

ANEXO A - COMSOL MULTIPHYSICS 3.4

INDEX:

A.1	Características del sistema	3
A.2	Requisitos del sistema	7
A.2.1	Requisitos generales.....	7
A.2.2	Licencias en red flotante	8
A.2.3	Sistema COMSOL Multiphysics Requerimientos para Microsoft Windows version 32 bits.....	8





A. COMSOL MULTIPHYSICS 3.4

A.1 Características del sistema

Esta actualización mayor de COMSOL incluye soporte multinúcleo (*multicore*), nuevos solucionadores, y muchas mejoras en los módulos físicos. Entre las características más destacables se encuentran:

- **El procesamiento multinúcleo reduce el tiempo para obtener la solución:** COMSOL Multiphysics 3.4 proporciona el máximo rendimiento computacional mediante el uso de procesadores multinúcleo y paralelismo de memoria compartida. Cada paso del flujo de trabajo en la simulación -mallado, ensamblaje y resolución- ahora se ejecuta en paralelo. COMSOL Multiphysics 3.4 utiliza el máximo número de núcleos disponible en el sistema, y los usuarios tienen un completo control sobre el número de procesadores dedicados a sus simulaciones.
- **El nuevo resolvidor segregado y las técnicas de estabilización incrementan el límite del tamaño del modelo:** Un resolvidor segregado con una interfaz fácil de usar reduce el consumo de memoria significativamente cuando se pretende resolver problemas de grandes dimensiones, como los de interacción fluido estructura o propagación de ondas en estructuras deformadas térmicamente.

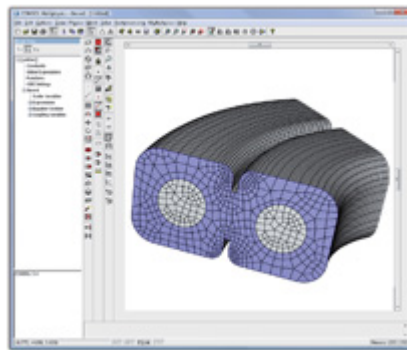


Figura B.1



Una importante actualización de los solucionadores iterativos de COMSOL han impulsado el rendimiento en dinámica de fluidos a nuevas alturas. Las nuevas y punteras técnicas de estabilización de mínimos cuadrados "Galerkin least squares" (GLS) complementan a los resolvedores iterativos, permitiendo resolver grandes problemas de flujos de fluidos con millones de grados de libertad.

- **Flujo multifase y convección libre:** El módulo de Ingeniería Química ha sido mejorado con una potente interfaz de modelado para la simulación de flujo multifase. Con ella, los usuarios ahora pueden simular flujos burbujeantes, como en fregaderos, y también configurar modelos de mezclas para simular emulsionamientos, sedimentación y otros procesos de separación.

Ahora los usuarios pueden expandir sus simulaciones para incluir flujo de densidad variable y convección libre. Los ingenieros encontrarán estas prestaciones particularmente útiles cuando quieran resolver flujo acoplado y conjugar problemas de transferencia de calor que se encuentran habitualmente en enfriamiento electrónico y análisis de intercambiadores de calor.

- **Estimación de parámetros:** Las actualizaciones de COMSOL Reaction Engineering Lab incluyen una potente nueva interfaz para correr estimación de parámetros no lineal en múltiples conjuntos de datos experimentales. Las salidas ahora se muestran con intervalos de confianza y desviaciones estándar.
- **Importación Spice:** La version 3.4 facilita la construcción y arranque de modelos de COMSOL como parte de simulaciones de circuitos basadas en SPICE gracias a la nueva interfaz de usuario SPICE del módulo AC/DC. Otra nueva característica interesante para aplicaciones electrónicas, de componentes eléctricos, geofísicas y electroquímicas es el análisis de pequeña señal para estudios de impedancia CA.
- **Análisis de fatiga:** El módulo de Mecánica de Estructuras ahora permite que los usuarios puedan predecir daños de fatiga de ciclo alto y bajo. Un conjunto de funciones de COMSOL Script calculan daños de fatiga a partir de entradas



constituidas por datos cargados y datos de fatiga de materiales deterministas, estocásticos o incluso no proporcionales.

Resumen de mejoras del programa principal:

- Soporte extendido para paralelismo de memoria compartida: mallado, montaje, preconditionadores, multirejilla, producto de matrices dispersas
- Resolvedor segregado integrado
- Método de mínimos cuadrados Galerkin (GLS) mejorado para difusión aerodinámica
- Soporte para restricciones puntuales no ideales
- Motor de modelado sólido interno mejorado
- Mallado cuadrangular libre en caras 2D y 3D
- Mallado de capa límite
- Copia de mallas desde un contorno a otro
- Variables de distancia de contorno
- Unidades adicionales
- Condiciones de contorno mejoradas y reorganizadas para modelado fluido-flujo
- Nuevos mapas de colores "wave" y "grayprint"
- Herramientas para calcular volumen, área, centro de gravedad, momento de inercia, etc.
- Añadido el soporte para MATLAB versiones 7.4 (2007a) y 7.5 (2007b)
- Nuevo modelo: Solución de la ecuación de Blotzmann de dos términos para un plasma de oxígeno

Novedades del módulo de ingeniería química

- Modo de aplicación de flujo burbujeante para modelado macroscópico de mezclas de líquido y burbujas de gas
- Modo de aplicación de modelo de mezcla para modelado macroscópico de mezclas de líquidos y partículas sólidas/burbujas líquidas/gotitas
- Condiciones de contorno para modelado fluido-flujo mejoradas y reorganizadas



- Mallado de capa de contorno
- Método de mínimos cuadrados Galerkin (GLS) mejorado para difusión aerodinámica
- Rendimiento y robustez mejorados para modelado fluido-flujo
- Entradas multifísicas predefinidas para flujo con densidad variable
- Entradas multifísicas predefinidas para interacción térmica fluido-sólido/transferencia de calor conjugada
- Nuevos modelos:
 - Ebullición de un líquido utilizando el modo de aplicación de flujo de dos fases a un nivel determinado
 - Flujo burbujeante en un fregadero de gas utilizando el nuevo modo de aplicación de flujo burbujeante
 - Llenado capilar utilizando el modo de aplicación de flujo de dos fases a un nivel determinado
 - Transporte de una oleada of analítico en una columna de cromatografía
 - Flujo de dos fases de una suspensión densa utilizando el nuevo modo de aplicación de mezcla
 - Rotura de gotita utilizando el modo de aplicación de flujo de dos fases a un nivel determinado
 - Efectos electroforéticos utilizados para la inyección de muestras en una válvula
 - Sedimentación en un clarificador secundario para tratamiento de aguas utilizando el nuevo modo de aplicación de mezcla
 - Flujo de fluido acoplado a balances térmicos y de materia con reacciones químicas utilizando el nuevo modo de aplicación para flujo con densidad variable.



Novedades del módulo de transferencia de calor

- Radiación con simetría axial
- Entradas multifísicas predefinidas para flujo con densidad variable
- Entradas multifísicas predefinidas para interacción térmica fluido-sólido/transferencia de calor conjugada
- Método de mínimos cuadrados Galerkin (GLS) mejorado para difusión aerodinámica
- Nuevo modelo:
 - Análisis axial de un inductor utilizando la nueva característica de radiación superficie a superficie para simetría axial.

A.2 Requisitos del sistema

A.2.1 Requisitos generales

Estos son los requerimientos comunes para todas las plataformas:

- Una unidad de CD-ROM o DVD para la instalación
- TCP/IP en todas las plataformas cuando se utilice un servidor de licencias
- Adobe Acrobat Reader 5.0 o superior para ver e imprimir la documentación de COMSOL en formato PDF

El espacio de disco real necesario varía con el tamaño de la partición y la instalación opcional de los ficheros de ayuda en línea. El instalador de COMSOL le informará de los requisitos de espacio en disco para una instalación en particular.



A.2.2 Licencias en red flotante

Las licencias en red flotante están soportadas en redes heterogéneas de ordenadores Windows, Linux, Sun, y Mac. Tanto el gestor de licencias como la aplicación COMSOL pueden correr tanto sobre Windows, Linux, Sun, o Mac, y un único ordenador puede correr ambos.

A.2.3 Sistema COMSOL Multiphysics Requerimientos para Microsoft Windows version 32 bits.

- Windows 2000, Windows XP, o Windows Vista.
- Pentium III o posterior
- OpenGL 1.1 de Microsoft o un acelerador que soporte OpenGL 1.1, o DirectX versión 8.0 o posterior. La tarjeta gráfica debería de tener al menos 32 MB de memoria.

A.3 Bibliografía:

[1] COMSOL Multiphysics 3.2 , User's Guide. Diciembre 2007

[2] User's Guide COMSOL.net :

<http://images.google.es/imgres?imgurl=http://www.ingenieria-electronica.com>



ANEXO B - INTRODUCCION Y CONCEPTO DEL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS

INDEX:

B.	MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS.....	11
B.1	Propiedades de los métodos de discretización.....	11
B.1.1	Consistencia.....	11
B.1.2	Estabilidad.....	11
B.1.3	Convergencia	12
B.1.4	Conservación	12
B.1.5	Valores limitados	12
B.1.6	Realizable.....	12
B.1.7	Exactitud.....	13
B.2	Método de Elementos Finitos.....	13
B.3	Conceptos importantes del Método de los Elementos Finitos	14
B.4	Bibliografía	¡Error! Marcador no definido.





B. MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS.

B.1 Propiedades de los métodos de discretización.

Los métodos de discretización deben tener ciertas características para asegurar un correcto funcionamiento. Es importante, pues, analizar los componentes de los métodos escogidos y comprobar que poseen las características deseadas.

Las características más importantes se detallan a continuación.

B.1.1 Consistencia

La discretización debe ser exacta cuando la medida de los espacios de la malla tiende a cero. Siempre existirá un error cuando se aproximan las ecuaciones diferenciales en los nodos. Para considerar que un método es consistente, hace falta que este error sea muy próximo cero cuando el espacio entre los nodos tienda a ser cero. Idealmente, todos los términos han de aproximarse con el mismo orden de exactitud.

B.1.2 Estabilidad

Un método numérico resulta estable si no magnifica los errores que aparecen en el curso del proceso numérico de la solución. Para los problemas temporales, la estabilidad garantiza que el método produzca una solución limitada siempre que la solución de la ecuación exacta se limite. Para los métodos iterativos, un método estable se un que no diverge. La estabilidad puede ser difícil de investigar, especialmente cuando las condiciones de límite y las no linealidades están presentes.

Por esta razón, es común investigar la estabilidad de un método para los problemas lineales con coeficientes constantes y sin condiciones de límite. Finalmente, con la experiencia y la intuición se puede determinar si el método puede aplicarse a problemas más complejos.



B.1.3 Convergencia

La convergencia se produce si la solución de las ecuaciones algebraicas tiende a la solución exacta de la ecuación diferencial cuando los espacios de la malla tienden a cero. Para los problemas de valores iniciales lineales, la condición necesaria y suficiente para la convergencia es que el método sea consistente y estable. Para los problemas no lineales, al estar influenciados fuertemente por condiciones de límite, la estabilidad y la convergencia de un método pueden ser difíciles de demostrar. Por lo tanto la convergencia se comprueba generalmente usando experimentos numéricos, es decir repitiendo el cálculo sobre una serie de mallas sucesivamente refinadas.

B.1.4 Conservación

Puesto que las ecuaciones que se solucionan son leyes de la conservación, el esquema numérico debe respetar estas leyes. Esto significa que, en estado constante, el valor de una cantidad que deja un volumen cerrado se igual a la cantidad que entra en este volumen. Esta es una característica importante del método de la solución, puesto que impone una restricción ante el error de la solución. Si se asegura la conservación de masa, momento y energía, el error solamente puede distribuir incorrectamente estas cantidades sobre el dominio de la solución.

B.1.5 Valores limitados

Las soluciones numéricas deben mantenerse dentro de los límites apropiados. Las cantidades físicamente no negativas deben siempre ser positivas; otras cantidades, como por ejemplo la concentración: debe encontrarse entre 0 y 1. Limitar los valores es difícil de garantizar, y sólo algunos sistemas de primer orden garantizan esta característica. Todos los sistemas de orden superior pueden producir soluciones fuera de los límites físicos; afortunadamente, esto sucede solamente en las mallas demasiadas gruesas y puede evitarse refinando la malla.

B.1.6 Realizable

Los modelos de los fenómenos que son demasiados complejos para tratarlos directamente (por ejemplo, modelos con turbulencia o modelos multifásicos), se deben



diseñar para garantizar soluciones físicamente realistas. Los modelos que no son realizables pueden dar lugar a soluciones no posibles físicamente, o a soluciones no convergentes. Si se desea poner un modelo en ejecución en un código CFD hace falta ir con cuidado con esta característica.

B.1.7 Exactitud

Las soluciones numéricas de los problemas serán solamente soluciones aproximadas. Además de los errores que se pudieron introducir en el curso del desarrollo del algoritmo de la solución, en la programación o configuración de las condiciones de límite de dominio, las soluciones numéricas incluyen siempre tres clases de errores sistemáticos:

- *Errores de modelado*, definidos como la diferencia entre el flujo real y la solución exacta del modelo matemático.
- *Errores de discretización*, definidos como la diferencia entre la solución exacta de las ecuaciones de conservación y la solución exacta del sistema algebraico de las ecuaciones obtenidas al aproximar estas ecuaciones diferenciales.
- *Errores de iteración*, definidos como la diferencia entre las soluciones iterativas y exactas de los sistemas algebraicos de las ecuaciones.

Un modelo presenta muchos posibles esquemas de solución y a menudo es difícil decidir la relación exactitud–tiempo deseable; normalmente, dependerá del objetivo final. En algunas ocasiones el objetivo final será obtener la exactitud deseada con el mínimo tiempo posible y en otras, será conseguir la exactitud máxima con los recursos disponibles.

B.2 Método de Elementos Finitos

De acuerdo con estas relaciones de conectividad se relaciona el valor de un conjunto de variables incógnitas definidas en cada nodo y denominadas grados de libertad. El conjunto de relaciones entre el valor de una determinada variable entre los nodos se puede escribir en forma de sistema de ecuaciones lineales. El número de ecuaciones de este sistema es proporcional al número de nodos.



El método de los elementos finitos es muy usado debido a su generalidad y a la facilidad de introducir dominios de cálculo complejos (en dos o tres dimensiones). Además, el método es fácilmente adaptable a problemas de difícil resolución analítica: problemas de difusión de calor; de mecánica de fluidos, para calcular campos de velocidades y presiones (Dinámica de fluidos Computacional, CFD); o de campo electromagnético.

Las ideas básicas de este método se originaron en avances en el análisis estructural de la industria aeronáutica en la década de los años 50. En la década de los 60 el método fue generalizado para la solución aproximada de problemas de análisis de tensión, flujo de fluidos y transferencia de calor. En la década de los 70 el método fue extendido al análisis de problemas no lineales de la mecánica del continuo. Hoy el método permite resolver situaciones físicas que puedan formularse mediante un sistema de ecuaciones diferenciales.

En sus principios el método de los elementos finitos no tuvo un fuerte impacto en la práctica de la ingeniería. Las principales causas eran, de una parte, la no disponibilidad de computadoras en los estudios de ingeniería, y, por el otro, el requisito de conocimientos profundos no solamente de la técnica y de los modelos matemáticos pertinentes sino también de programación computacional.

Actualmente, la situación se completamente diferente, puesto que las computadoras modernas soportan, sin demasiados inconvenientes, poderosos programas de propósito general y de fácil utilización.

B.3 Conceptos importantes del Método de los Elementos Finitos

Tal y como se aprecia en el apartado anterior, el lenguaje de los elementos finitos está construido sobre algunos conceptos importantes. Estos conceptos, descritos a continuación, son muy importantes para el desarrollo del Método de los Elementos Finitos [3]:

- Dominio del problema: espacio físico dónde sucede el fenómeno a estudiar. Todos los dominios son tridimensionales, puesto que cada punto de este dominio necesita tres coordenadas por estar completamente definido.



- Frontera del dominio: entidad geométrica que actúa de interfaz entre el dominio y el exterior. En una dimensión, el dominio es un segmento de una línea y el límite lo marcan los dos puntos que delimitan este segmento. En 2D, el dominio es una superficie acotada y la frontera son las líneas que lo acotan. Finalmente, en 3D, el dominio es un cuerpo de extensión finita y la frontera del dominio son las superficies que lo delimitan.
- Elemento finito: en FEM se aproxima el dominio continuo por una unión de subdominios más simples, denominados elementos finitos. En 3D, los elementos acostumbran a ser hexaedros, pentaedros o tetraedros.
- Nodo: punto dónde se calcula la solución del problema, para después extenderla al resto del dominio mediante la interpolación. Pueden estar en los vértices o dentro de los elementos.
- Grados de libertad: número de variables del problema para determinar completamente el problema. El número de grados de libertad depende tanto del número de variables como del número de elementos finitos.
- Funciones de interpolación: funciones para extender la solución obtenida en los nodos al resto del dominio. En FEM se utilizan polinomios.





ANEXO C - COGENERACIÓN

INDEX:

C.1	Central térmica convencional.....	19
C.2	Los combustibles fósiles en la producción electricidad.....	20
C.3	Comparación de generación de energía vs cogeneración.....	21
C.4	Aplicaciones de la cogeneración.....	22
C.5	Ventajas de la cogeneración.....	23
C.6	El futuro de las centrales térmicas en relación con el medio ambiente	23





C. COGENERACIÓN

C.1 Central térmica convencional

Las centrales térmicas convencionales utilizan como combustible carbón o de fuelóleo, y hoy día siguen dando rendimientos muy apreciables. En las de carbón se llega a aprovechar lignito de muy baja calidad, gracias a las mejoras tecnológicas que facilitan su combustión y limpian sus humos, aunque en algunos casos haya que recurrir a chimeneas altísimas para su evacuación, como es el caso de la *Central de Puentes de García Rodríguez*, de Endesa, cuya chimenea alcanza los 356 metros de altura.



Figura C.1. Central térmica convencional de Puentes de García

Las de fuelóleo presentan como principal inconveniente las oscilaciones del precio del petróleo y derivados, y a menudo también se exigen tratamientos de desulfuración de los humos para evitar la contaminación y la lluvia ácida.



C.2 Los combustibles fósiles en la producción electricidad

El carbón representa cerca del 70% de las reservas energéticas mundiales de combustibles fósiles conocidos actualmente. Constituye, y probablemente seguirá constituyendo en un futuro próximo, la materia prima energética más utilizada en la producción de energía eléctrica a escala mundial. Sin embargo, en el caso español, la disponibilidad relativamente limitada de reservas nacionales y, en muchos casos, su baja calidad supone un serio reto, dadas las exigencias medioambientales y el futuro marco de competencia.

A 31 de diciembre de 1995, la potencia total instalada de las centrales eléctricas españolas en servicio ascendía a 48.058 MW, de los cuales 17.478 MW correspondían a centrales hidroeléctricas, 23.163 MW a centrales termoeléctricas clásicas y 7.417 MW a centrales nucleares.

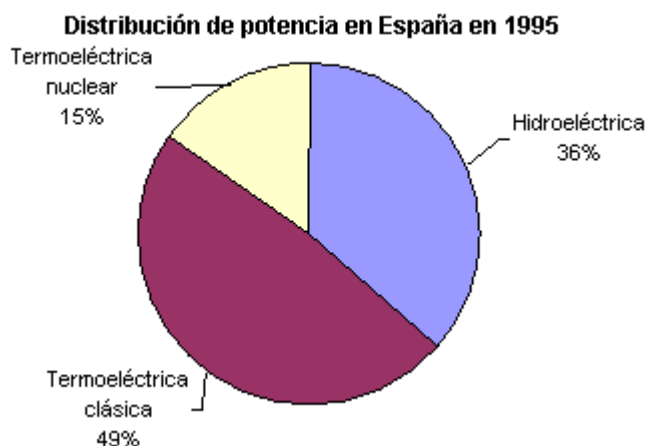


Figura C.2. Distribución de la potencia en España

De los 168.904 millones de kWh que se produjeron en España en 1995; el 52,5% procedían de centrales termoeléctricas clásicas. En particular, un 47% de la cifra total fue generada a partir de carbón.



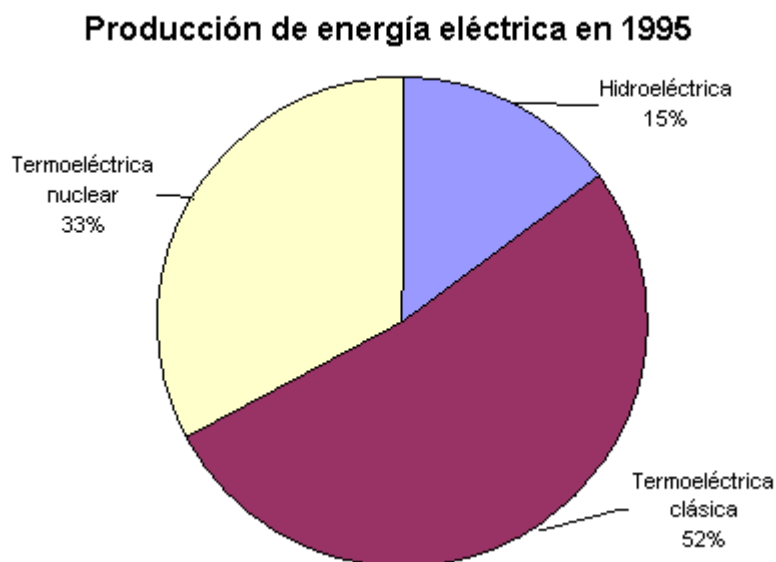


Figura C.3. Producción de energía eléctrica en 2005.

Estos datos reflejan, en definitiva, la importancia del carbón para el suministro de energía eléctrica. Una importancia que es aún más acusada en el caso de carbones nacionales, pues éstos representan cerca del 87% de toda la electricidad que se genera en España a partir del carbón. Aunque el Plan Energético Nacional 1991-2000 promueve un mayor uso de otros combustibles, como el gas natural y el carbón importado, la participación del carbón nacional en el suministro eléctrico seguirá siendo muy importante en las próximas décadas.

En cuanto al fuelóleo y al gas natural, la aportación a la producción eléctrica alcanzó en 1993 el 2,3% del total producido.

C.3 Comparación de generación de energía vs cogeneración.

En el camino energético convencional, la energía primaria (gas natural o petróleo) se convierte en combustible y parte de esta energía llega al usuario pero la otra parte la reutiliza el sector energético para convertirla en electricidad en sus centrales.



En cambio, en la cogeneración se utilizan otras tecnologías también conocidas y experimentadas, pero siguiendo otro camino que le permite llegar a rendimientos mucho más altos.

En la cogeneración, para usos a pequeña escala, el usuario adquiere combustible mediante el cual produce simultáneamente electricidad y calor en su propio centro y equilibra los excesos o defectos mediante intercambio con la compañía del suministro eléctrico.

En los sistemas de cogeneración, el combustible utilizado para generar la energía eléctrica y térmica es mucho menos que el utilizado mediante sistemas convencionales de generación de energía eléctrica y térmica por separado, es decir, que del 100% de energía contenida en una central termoeléctrica convencional, solo el 33% se convierte en energía eléctrica, el resto se pierde a través del condensador, los gases de salida, las pérdidas mecánicas, y las pérdidas eléctricas por transmisión y distribución entre componentes.

Por lo que se refiere a los costes, en una planta de ciclo combinado, la inversión necesaria para instalar un módulo es del orden de 50% en relación a la inversión en una planta con carbón importado, y el tiempo de construcción es aproximadamente un 30% menor.

C.4 Aplicaciones de la cogeneración

La cogeneración puede aplicarse a cualquier tipo de instalación, es suficiente con el que usuario tenga necesidades térmicas (vapor, agua caliente, gases calientes, fríos, etc.) medianas/altas durante un período de tiempo prolongado (aproximadamente más de 5.000 horas al año) o bien, que produzca combustibles residuales o efluentes térmicos de suficiente nivel.

En resumen, puede aplicarse a diferentes sectores, pero en el industrial es en el que cuenta con mayores oportunidades para implantar esta tecnología de industrias.



C.5 Ventajas de la cogeneración

- Ahorro económico. Se produce una gran diferencia económica entre el coste de la electricidad obtenida de la red y la energía eléctrica obtenida a partir de la cogeneración. Además, el coste de la energía obtenida se produce simultáneamente con la energía eléctrica y en la cogeneración tiene un coste inferior que en otros sistemas de obtención.
- Disminución de pérdidas en el sistema eléctrico y las inversiones en el transporte y la distribución.

Además, la cogeneración posee otras cualidades intrínsecas a su generación, que convierten a este proceso en uno de los más rentables de la generación de energía a nivel industrial.

- Aumento de la competitividad industrial y de la competencia del sistema eléctrico.
- Ahorro de energía prima del país.
- Disminución de las importaciones de combustible.
- Menor impacto medioambiental y reducción de las emisiones de CO₂.
- Es una tecnología ampliamente difundida en el sector industrial.
- Mejor adecuación entre la oferta y la demanda energética que provoca una reducción de costes.

C.6 El futuro de las centrales térmicas en relación con el medio ambiente

Es indudable que, en el futuro, las centrales térmicas de carbón continuarán sometidas a fuertes condicionantes ambientales.

En relación con las emisiones de SO₂ y NO_x se dispone de nuevas alternativas que serán aplicables en un futuro próximo. Algunas de ellas son:



- Alargamiento de la vida de las instalaciones adaptándolas a las exigencias ambientales.
- Depuración avanzada del carbón.
- Combustión en lecho fluidizado a presión o atmosférico.
- Gasificación del carbón integrada en ciclo combinado.
- Sistemas mixtos avanzados.
- Aplicación de ciclos termodinámicos avanzados.

Algunas de estas posibilidades se hallan todavía en fase de desarrollo, sin llegar a ser económicamente viables por el momento. Otras, en cambio, sí son aplicables en la actualidad.

En el caso del sector eléctrico español, se está realizando una combinación entre la investigación en tecnologías innovadoras y la implantación de aquellas que son económicamente razonables. Paralelamente se continúan desarrollando programas relacionados con el uso limpio del carbón. En España se debe hacer un especial esfuerzo en este sentido ya que muchos carbones nacionales introducen dificultades técnicas y económicas adicionales.

Existen pruebas científicas sólidas y concluyentes que demuestran la incidencia real de las emisiones de CO₂ sobre el cambio climático. Mientras esto se produce, el sector eléctrico puede contribuir a reducir dichas emisiones a través de las siguientes acciones:

- Desarrollo de esquemas de ahorro y conservación de la energía.
- Modificación de las políticas de combustibles (gas natural, biomasa) y de los sistemas de generación (energía nuclear y renovables).

Por otro lado, las posibilidades de reducir las emisiones de gases ligados al efecto invernadero mediante cambio de combustible son, en la actualidad, restringidas. En las conclusiones del Congreso del Consejo Mundial de la Energía (CME) de 1992 se señala que el carbón es la fuente más diversificada y con mayores reservas globales en el



mundo. Por tanto, constituye una fuente energética fundamental en la que debe apoyarse un suministro estable a largo plazo.





ANEXO D – CALDERAS DE RECUPERACIÓN DE CALOR

INDEX:

D.1	Circulación natural y forzada.....	29
D.2	Diferencia entre caldera convencional y H.R.S.G.....	30
D.3	Parámetros de diseño y rendimiento	31
D.4	Variaciones de la presión del agua y la temperatura de los gases.....	32





D. CALDERAS DE RECUPERACION

D.1 Circulación natural y forzada

La diferencia fundamental entre la circulación forzada y la natural es que en la primera se dispone de una bomba que fija una velocidad de circulación de agua y garantiza siempre la circulación de la misma independientemente de las condiciones de operación mientras que en la segunda, el movimiento del agua se produce por la diferencia de densidades entre el agua líquida y el vapor, así como por posición relativa entre el calderín del vapor y el del agua.

Los dos tipos presentan sus ventajas e inconvenientes de manera que ninguna de las dos tecnologías es preponderante sobre la otra, sino que según el tipo de aplicación será más interesante un tipo de circulación u otro. Así entre las ventajas principales de las calderas de recuperación acuotubulares de circulación natural cabe destacar:

- Operación fiable por carecer de elementos mecánicos móviles como son las bombas de circulación.
- Menor consumo energético, por no tener el consumo de las bombas.

Las de circulación forzada por su parte presentan como principales ventajas:

- Son de menor tamaño, puesto que para una misma potencia necesitan menores superficies de intercambio.
- Respuesta más rápida a las variaciones de carga.
- Calderín de vapor de menor tamaño.

Puesto que las calderas de recuperación de calor no pueden aprovechar la transmisión de calor por radiación al estar los gases a temperatura menores que en una caldera convencional, y al tener estos gases una elevada velocidad, deben aprovechar al máximo la transmisión de calor por convección, de ahí que las baterías estén aleteadas para aprovechar la mayor superficie de intercambio posible. El número de aletas está limitado,



puesto que se debe dejar suficiente espacio para limpieza de los tubos, además, cuando la temperatura de la post combustión supera los 800°C, puede existir problemas mecánicos en las aletas por lo que se aconseja reducir su número o incluso eliminarlas.

D.2 Diferencia entre caldera convencional y H.R.S.G

1.- En una caldera convencional los mecanismos de transferencia de la energía térmica son por convención y radiación. En una caldera de recuperación de calor sólo es por convención. El flujo de calor en las primeras es muy alto del orden de 300 kW/m² (referido a m² de superficie interna del tubo), mientras que en las calderas de recuperación es de 150 kW/m².

2.- En una caldera convencional los productos de la combustión tienen una temperatura inicial superior a los 1500 °C. Al salir del economizador, que sería la última superficie de intercambio de energía térmica, la temperatura se encuentra próxima a los 400 °C. En el caso de una caldera de recuperación de calor, la temperatura de entrada de los gases calientes es ligeramente superior a los 500 °C, mientras que la de salida es algo superior a los 150 °C.

3.- El agua en una caldera convencional puede entrar con una temperatura superior a los 200°C y se obtiene vapor de unos 540 a 570°C. En el caso de una caldera de recuperación, el agua entra con una temperatura comprendida entre los 60 y 120°C y sale alrededor de los 500°C.

4.- El diseño de superficies de transferencia de energía térmica es mucho mas complejo en las calderas convencionales que en las de recuperación.

5.- El caudal de gases que se necesita por MW (en turbina de vapor) en una caldera de recuperación es del orden de 17 a 28t/h, mientras que en una caldera convencional es de 7 a 19 t/h. La superficie de intercambio, por MW (en turbina de vapor) es de 800 a 1300 m². El volumen de la caldera de recuperación es de 70 a 100 m³ por MW, mientras que en una caldera convencional es de 50 a 65 m³ por MW.



D.3 Parámetros de diseño y rendimiento

Para el diseño de las calderas de recuperación se deben conocer las características de los gases con los que va a trabajar. Centrándonos en las calderas acopladas a turbinas de gas, con un solo nivel de recuperación, podemos decir que la temperatura media de los gases se situará entre los 400 y 550 °C, con un porcentaje de oxígeno superior al 15%. Es también, interesante conocer la velocidad y caudal de los gases de escape, para tener en cuenta los posibles problemas de vibraciones en conductos, que en el caso de la turbina son elevados (80 m/s de velocidad media en los gases de salida)

Puesto que el caudal másico de gases es constante, la temperatura de salida de los mismos, del recuperador, depende únicamente de la energía intercambiada en la caldera de recuperación, es decir, del nivel térmico deseado en el vapor obtenido. La temperatura del vapor dependerá de la presión a la que se deba utilizar en el proceso, no interesando que sea superior ya que más presión significa menor cantidad de vapor producido y pérdidas de energía al tener que disminuir la presión para su utilización.

No obstante la temperatura de salida de los gases se encontrará siempre entre los 100 y 160 °C, siendo más aconsejable el rango 140-160, pues, por debajo de los 120 °C, pueden producirse condensaciones sobre la batería del condensador, en forma de ácido sulfúrico. Por otro lado, la temperatura de entrada del agua oscilará entre los 105 y 120 °C.

Los dos parámetros de diseño con los que se trabaja son:

- “Pinch-Point”: Diferencia de temperaturas entre los gases de escape a la salida del evaporador y la temperatura de saturación del agua a la presión de trabajo.
- “Approach Point”: Diferencia entre la temperatura de saturación del agua a la presión de trabajo y la temperatura del agua a la salida del economizador.

☞ Calentamiento en el economizador



Una caldera de recuperación con un “Pinch point” reducido indica que presenta una importante recuperación en el nivel térmico de los gases, lo que supondrá una elevada superficie de intercambio. Esto implica menores costes energéticos frente a mayores costes económicos de inversión, por lo que se debe llegar a un valor de compromiso en el valor de este parámetro, así los valores manejados normalmente varían entre 8 y 22°C.

El “Approach point”, por su parte debe tomar un valor que garantice la no evaporación del agua circulante por el economizador en ninguna condición de operación de la instalación. Por ello se trabaja con agua subenfriada que posteriormente es calentada en el economizador hasta alcanzar una temperatura entre 5 y 20°C por debajo de la saturación del agua la salida del mismo. La pérdida en la producción de vapor que se produce por el valor del “approach point”, se compensa con la protección dada al economizador.

La velocidad de circulación de los gases por la caldera es un dato a tener en cuenta, así, por un lado una velocidad elevada ayuda a aumentar el coeficiente de película y por tanto la transmisión de calor por convección, sin embargo, por otro lado aumentan las pérdidas de carga en la caldera lo que provoca fenómenos de contrapresión en la salida de la turbina gas y por tanto menor trabajo y rendimiento de la misma.

El vapor producido, fijados todos los parámetros, se puede calcular con uno de los dos balances expuestos a continuación:

1. La disminución de entalpía de los gases, desde la entrada a la caldera hasta la salida del vapor, punto en el que se ha fijado en el “pinch point”, debe ser igual al aumento de entalpía del agua desde la entrada al evaporador hasta la salida del vapor de la caldera, añadiéndole las pérdidas que se producen.
2. La disminución de entalpía de los gases desde la entrada a la caldera hasta la entrada en la chimenea, debe ser igual al aumento de entalpía del agua desde la entrada en la caldera hasta la salida del vapor de la misma.

D.4 Variaciones de la presión del agua y la temperatura de los gases

Las dos magnitudes que pueden variar durante el funcionamiento de la instalación son la presión del vapor y la temperatura de los gases.



Cuando se produce un aumento de la presión del vapor, una vez fijado el “Pinch point”, y manteniendo todas las magnitudes de entrada, la temperatura de evaporación también aumenta y como consecuencia los gases de escape salen más calientes del evaporador. Todo esto da lugar a una disminución en la producción de vapor.

De la misma forma una disminución de la temperatura de entrada de los gases también conduce a una disminución en la cantidad de vapor producida, pues se produce una peor transferencia de calor lo que provoca una mayor temperatura de salida de los gases. Por otro lado un aumento en la temperatura de entrada de los gases hace aumentar considerablemente el rendimiento de la postcombustión.

El rendimiento de la caldera se evalúa considerando la energía transferida al vapor respecto de la energía disponible, siendo ésta la diferencia entre la entalpía de los gases a la entrada y la de los gases a la salida. Cuando existe postcombustión, la energía disponible se aumenta en el producto del caudal másico de combustible inyectado y el poder calorífico inferior.





ANEXO E – PLANOS Y ESPECIFICACIONES DE LA CALDERA H.R.S.T DE LA C.T.C.C.

INDEX:

E.	PLANOS Y ESPECIFICACIONES DE LA CALDERA H.R.S.T	37
E.1	PLANOS DE LA CALDERA	37
E.2	Especificaciones técnicas de la caldera	43





E. PLANOS Y ESPECIFICACIONES DE LA CALDERA H.R.S.T

Estos planos y especificaciones de la caldera, son las reales utilizadas en la C.T.C.C. de Besós y se han obtenido de la visita a la central, de los archivos del proyecto de instalación de la central y los planos de los componentes.

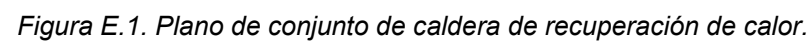
Estos planos, se han utilizado para la realización de la geometría de la simulación, dibujando un modelo a escala de la caldera real, con algunas simplificaciones para disminuir la complejidad y el tiempo de cálculo de la simulación.

En cuanto a geometría, por ejemplo, una de las simplificaciones que se ha realizado, ha sido la de considerar los bancos de tubos, como una superficie continua equivalente con los mismos parámetros característicos del banco de tubos.

E.1 PLANOS DE LA CALDERA

Se adjuntan varias vistas de la caldera, que son los dibujos del diseño en sí de ésta.





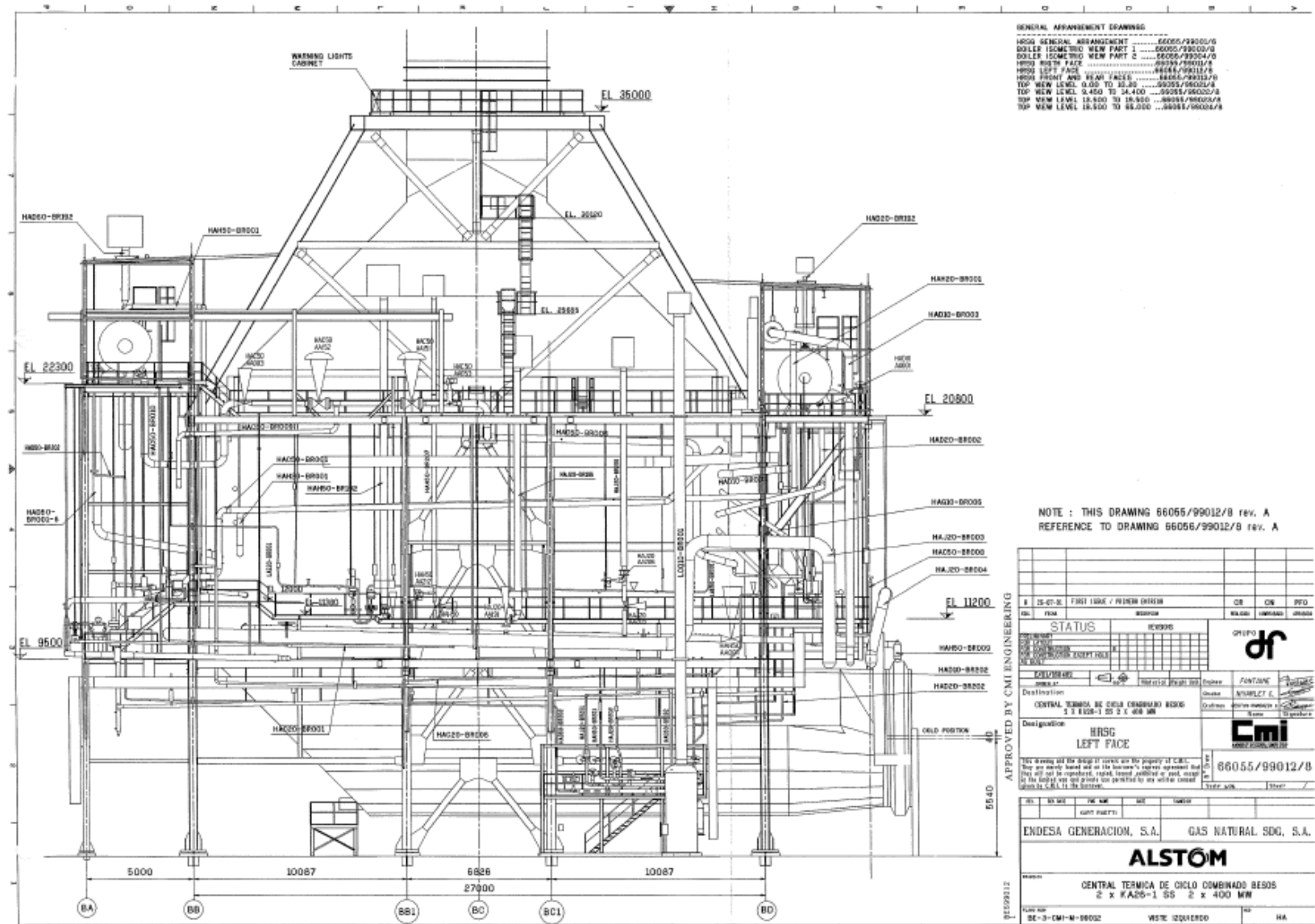


Figura E.2. Vista lado izquierdo de la caldera de recuperación de calor.

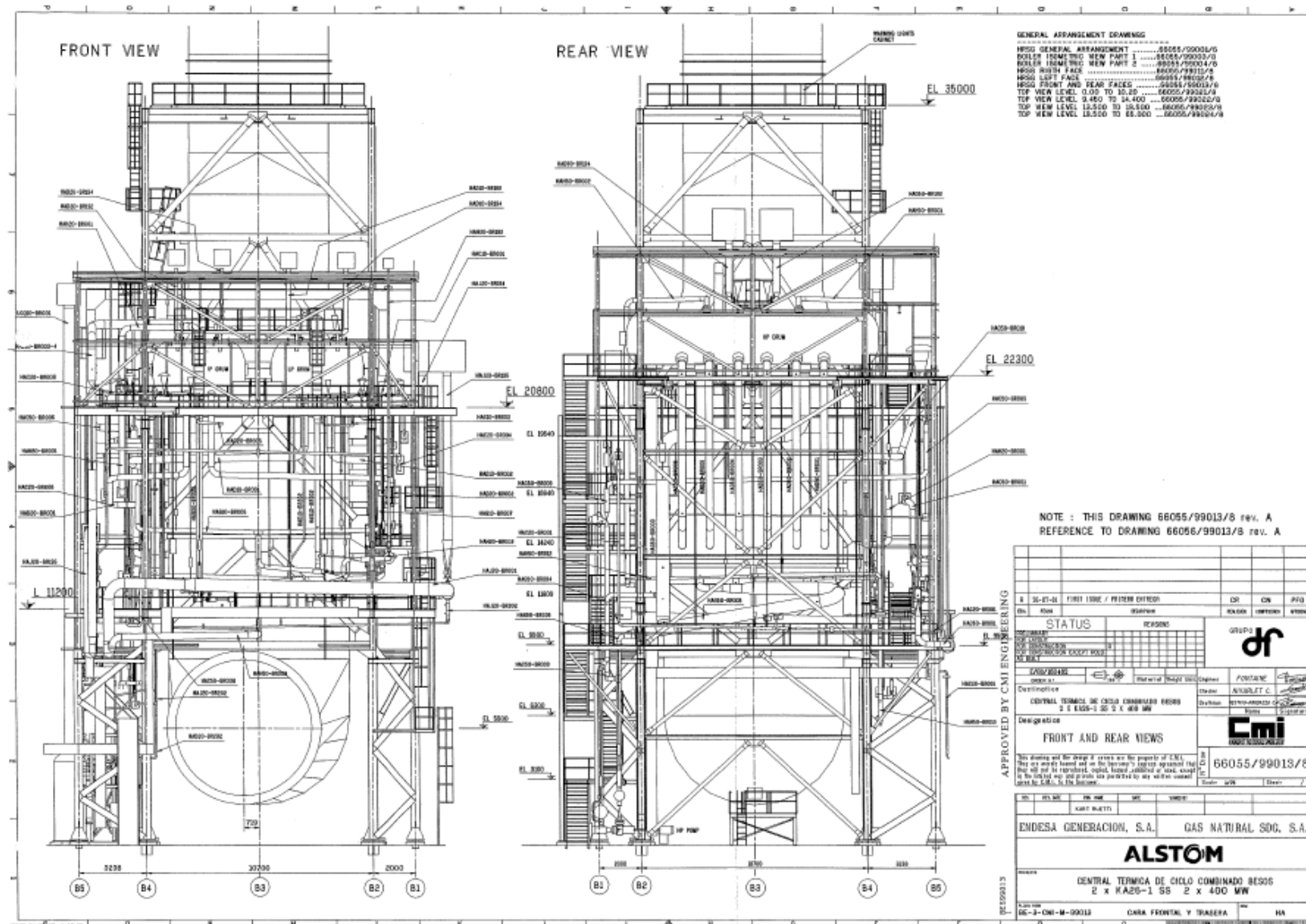
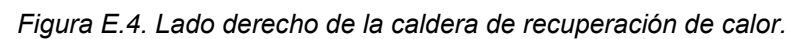
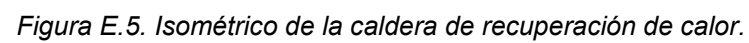


Figura E.3. Vista caras frontal y trasera de la caldera de recuperación de calor.





E.2 Especificaciones técnicas de la caldera













ANEXO F – FORMACIÓN DE NO_x

INDEX:

F.2	Fuentes y concentraciones del NO _x	51
F.3	Termodinámica de la formación del NO y del NO ₂	56
F.4	Cinética de la formación del NO en los procesos de PostCombustión.	59
F.4.1	Estudio cualitativo de la cinética del NO.	59
F.4.2	Estudio cuantitativo de la cinética del NO.	60





F. CONCENTRACIÓN DE NOX

F.1 Introducción

Los óxidos gaseosos estables del nitrógeno incluyen el N_2O (óxido nitroso), NO (monóxido de nitrógeno), N_2O_3 (trióxido de nitrógeno), NO_2 (dióxido de nitrógeno) y N_2O_5 (pentóxido de nitrógeno). También, existe una forma inestable, el NO_3 . De éstos, los únicos que están presentes en la atmósfera en cantidad significativamente son el NO_2 , NO y NO_2 . Estos tres son contribuyentes potenciales a la contaminación del aire. El óxido nitroso es un gas inerte con características anestésicas. Su concentración ambiental es de 0,50 ppm, que está considerablemente por debajo de la concentración del umbral para producir un efecto biológico.

El monóxido de nitrógeno es una gas incoloro y su concentración ambiental es por lo general menor que 0,5 ppm. A estas concentraciones, su toxicidad biológica en términos de la salud humana es insignificante. Sin embargo, es un precursor de la formación del dióxido de nitrógeno y es también un compuesto activo en la formación de la nube fotoquímica. El control del NO es un factor importante en la reducción de la contaminación del aire. El dióxido de nitrógeno es un gas pardo rojizo y es muy visible cuando está presente en una suficiente cantidad. La norma para la calidad ambiental del aire con respecto al NO_2 , se fijó inicialmente en 0,25 ppm. No se conocen del todo los efectos toxicológicos y epidemiológicos del NO_2 sobre los seres humanos. El riesgo ambiental del dióxido de nitrógeno está asociado principalmente con los efectos del contaminante en los pulmones.

F.2 Fuentes y concentraciones del NO_x

Más del 90% de todos los óxidos de nitrógeno producidos por el hombre se originan por el consumo de combustible. A una escala nacional, aproximadamente la mitad del NO_x proviene de fuentes estacionarias, mientras que el resto proviene de fuentes móviles, tales como los motores de encendido por chispa o por compresión de los automóviles.

Sobre una base global, la tasa de emisión de NO_x producida por el hombre no representa una seria preocupación en la actualidad. Los óxidos de nitrógeno son parte esencial del ciclo de nitrógeno en la naturaleza. El dióxido de nitrógeno se hidroliza a ácido nítrico en la atmósfera, que se precipita a su vez como nitrato. Estos últimos



regresan a la superficie terrestre como fertilizante para promover el crecimiento orgánico.

El ácido nítrico es el principal contribuyente de la lluvia ácida. Se estima que el NO_x formado en este ciclo natural asciende a 500×10^6 toneladas/año. Se tiene, como resultado de este ciclo que la concentración promedio de fondo del NO_x , en ambientes no contaminados, es alrededor de 1 ppm. Por el contrario, las áreas metropolitanas urbanas tienen concentraciones que promedian frecuentemente 40 a 80 ppm, o más altas. La máxima concentración de los óxidos de nitrógeno en las principales áreas urbanas pueden alcanzar los niveles de 0,3 a 1,4 ppm, para tiempos promedio de 1 día o menos.

La contaminación del aire asociada con el NO_x representa un problema local. Con base a los conocimientos médicos actuales y a las concentraciones del NO_x , este último no se considera un riesgo para la salud. El daño real presentado por el NO_x a las concentraciones que se encontraron en las áreas metropolitanas se basa en el papel que ésta tiene en las reacciones fotoquímicas que conducen a la formación del neblumo. Estas reacciones llevan a la formación de compuestos químicos que tienen efecto adverso directo sobre los seres humanos y las plantas. En algunas situaciones, el NO_x podrá estar presente a una concentración suficientemente alta, y sin embargo, no reaccionar para la formación del neblumo, debido a que están ausentes otras condiciones para la reacción. No obstante, casi todas las principales ciudades en cualquier país tecnológicamente avanzado, experimentan a veces hoy en día, los efectos inducidos por la presencia de NO_x .

En una fuente de emisión, la concentración de los óxidos de nitrógeno es mucho más elevada que los valores ambientales. El tipo de combustible que se utiliza puede alterar significativamente la tasa de emisión. Generalmente, las emisiones de NO_x basándose en la misma energía liberada, aumentan en el orden gas-petróleo-carbón.

La cantidad de NO_x dispersada en la atmósfera se puede reducir de dos maneras. El método primario consiste en controlar la reacción que produce el contaminante. Como una segunda posibilidad, se podría remover el contaminante después de que se ha formado. Los métodos de control para las emisiones de NO_x requieren la comprensión de los principales factores causantes de la formación de NO_x . Esto, requiere una comprensión general de la química básica, termodinámica y cinética de las reacciones



de formación. Una gran mayoría de las emisiones de NO_x proceden del consumo de combustibles en dispositivos estacionarios y móviles. Las principales fuentes de NO_x que corresponden a la combustión se encuentran en la fabricación y uso del ácido nítrico.

Existen dos fuentes de nitrógeno que contribuyen a la formación de los óxidos de nitrógeno en las reacciones de combustión. La fuente inevitable en las reacciones entre el combustible y el aire, es el propio aire, que contiene nitrógeno y oxígeno moleculares en una relación molar de aproximadamente 3,75:1. La evidencia indica que los combustibles que contienen nitrógeno en su estructura pueden ser causantes de una apreciable fracción del nitrógeno que aparece finalmente como NO_x .

Esto no es lo que sucede en realidad. A pesar de que la forma ambiental o global del contaminante NO_x sea NO_2 , los gases de la combustión que salen de la mayoría de los procesos de combustión, contendrán predominantemente NO . Aproximadamente, del 90 al 95% del NO_x emitido en los procesos de combustión aparecerá bajo la forma de NO . Como se ha visto anteriormente, el NO en los gases de combustión es termodinámicamente inestable según entra al medio ambiente y cae su temperatura. No obstante, tanto la descomposición del NO en NO_2 y O_2 , como la reacción del NO con el O_2 , para formar NO_2 , están limitadas cinéticamente.

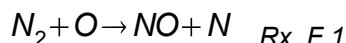
Según cae la temperatura por debajo de 1550 °K las tasas de estas reacciones se hacen muy pequeñas y la cantidad de NO_2 formado a temperaturas más bajas será bastante pequeña. Por tanto, el NO formado en los gases de la combustión a temperaturas más altas es arrastrado a la atmósfera ambiental. El volumen de la reacción de oxidación del NO al NO_2 tiene lugar en la atmósfera durante un periodo dictado por la cinética de las reacciones. La descomposición del NO en O_2 y N_2 está limitada por la alta energía de activación de la reacción, la que limita la tasa. Por tanto, el NO formado a temperaturas altas, forma preferentemente NO_2 a temperaturas más bajas, antes que descomponerse.

El mecanismo cinético de la reacción para la formación de NO_2 a partir de N_2 , no es tan simple ni tan sencillo como el presentado por las ecuaciones globales Ec. F1 y Ec. F2. En primer lugar, existe la evidencia de que se puede formar una cantidad considerable de NO_2 en la zona de precalentamiento que precede a la zona principal de la llama de

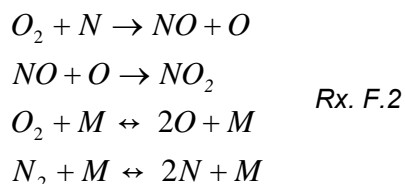


combustión. Parte de este NO_2 se descompone en NO en la zona de la llama, y se formará NO por algún otro mecanismo dentro o por encima de la zona de la llama.

En segundo lugar, las reacciones globales se obtienen por medio de un complicado conjunto de reacciones cinéticas que pueden incluir cierto número de especies intermedias. Se considera que la tasa a la que se forma el NO , está controlada por la reacción:



Como suplemento a esta reacción también se podrían encontrar las siguientes reacciones importantes dentro del esquema global de reacción:



donde M es el cuerpo que no reacciona.

Por tanto, a pesar de que se trata específicamente de la formación del NO y NO_2 en las reacciones de precombustión, combustión, y postcombustión, la química que interviene resulta compleja. De aquí la importancia de dos parámetros como son la temperatura y el tiempo. A temperaturas elevadas (>1900 °K) tanto la termodinámica como la cinética favorecen la formación de NO . Por tanto, se deberán evitar los picos de temperatura.

Existen dos maneras para obtener este resultado:

- Evitar las altas tasas de liberación de calor.
- Alcanzar altas tasas de remoción de calor.

Un resultado posible a estos métodos sería limitar a un mínimo el tiempo de residencia a las temperaturas pico. Si la temperatura en la zona de combustión se puede disminuir, las tasas de reacción se convertirán entonces en el factor limitante. A temperaturas más bajas, la cinética de formación es más importante que la cinética de descomposición, ya que no se llega al equilibrio.

En la figura siguiente se muestran dos posibles perfiles de temperatura contra tiempo para un elemento gaseoso que pasa por una zona de combustión.



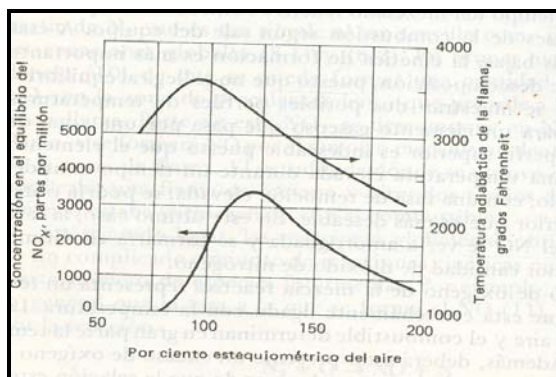


Figura F.1. Concentración NOx en función % aire estequiométrico y Temperatura.

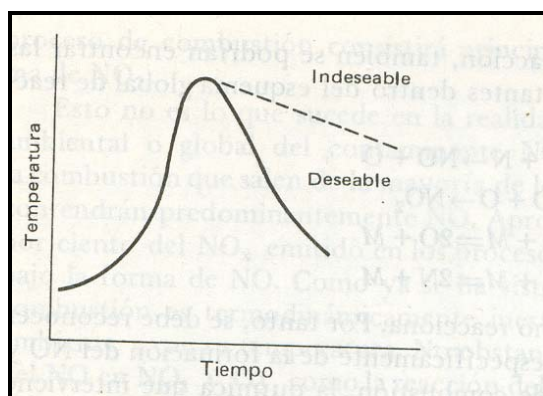


Figura F.2. Evolución temperatura en función del tiempo.

El perfil superior es indeseable ya que el elemento se mantiene a una temperatura elevada durante un tiempo considerable. En el perfil inferior, que podría obtenerse con una tasa de remoción elevada, la tasa de formación del NO se vería amortiguada y se formaría en último término una cantidad menor de dióxido de nitrógeno.

Un tercer parámetro estrechamente ligado con la temperatura es el contenido de oxígeno de la mezcla. La relación entre el aire y el combustible determinan en gran parte la temperatura pico. Además, deberá estar presente un exceso de oxígeno a fin de que reaccione con el nitrógeno. A pesar de que la relación estequiométrica entre el aire y el combustible conduce esencialmente a la máxima temperatura de combustión posible la concentración máxima en equilibrio del NO_x ocurre a un por ciento de aire estequiométrico algo más alto del 100%. Esta tendencia se muestra en la Figura F.2. En el equilibrio, la concentración de NO_x es un máximo alrededor del 115 % del aire

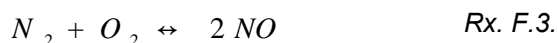


estequiométrico. La presencia de un aumento en la concentración de oxígeno lleva a una producción mayor de NO en el equilibrio.

La combustión constituye un enfoque para el control del NO_x cuando está cerca de los valores estequiométricos del aire. Esto es una causa de problemas con los otros contaminantes del aire en los procesos de combustión.

F.3 Termodinámica de la formación del NO y del NO₂

Para interpretar correctamente los datos, hacer sugerencias para la modificación de los equipos en uso, y diseñar nuevos equipos, se deberá tener un entendimiento básico de la termodinámica y cinética de las reacciones entre el nitrógeno y el oxígeno, especialmente a altas temperaturas. Las dos reacciones globales de importancia son aquellas que producen monóxido de nitrógeno, NO, y dióxido de nitrógeno, NO₂. Las reacciones de equilibrio son:



En la tabla siguiente se muestra la ecuación de la constante de equilibrio K_p para la reacción Rx F.3. y los valores típicos de K_p basados en las tablas termodinámicas de JANAF. El valor de K_p es extremadamente pequeño para temperaturas por debajo de 1000°K.

Luego, hasta la temperatura, la presión parcial del NO, por tanto, la cantidad en equilibrio de NO sería muy pequeña. Por encima de 1000°K podrían formarse cantidades apreciables de NO.

$$N_2 + O_2 \leftrightarrow 2NO \quad K_p = \frac{(pNO)^2}{(pN_2)(pO_2)} \quad \text{Ec. F.1. y F.2}$$

T		K _p
(°K)	(°F)	
300	80	10 ⁻³⁰



1000	1340	$7,5 \times 10^{-9}$
1200	1700	$2,8 \times 10^{-7}$
1500	2240	$1,1 \times 10^{-5}$
2000	3140	$4,0 \times 10^{-4}$
2500	4040	$3,5 \times 10^{-3}$

Tabla F.1. Constantes de equilibrio para la formación de NO a partir de oxígeno y nitrógeno molecular.

La tabla que sigue a continuación presenta una lista de la cantidad teórica de NO en equilibrio para dos situaciones especiales. Los datos de la tercera columna son para el nitrógeno y el oxígeno inicialmente presentes en una relación 4:1. la cuarta columna es para una razón 40:1. Los valores indican en realidad dos puntos. Primero, la formación del NO en equilibrio aumenta rápidamente con la temperatura. Segundo, los valores de equilibrio del NO tienen el mismo orden de magnitud que los medidos.

Los valores de K_p para la reacción Rx F.4. aparece en la lista de la *Tabla F.2*. La constante de equilibrio, para la formación del NO_2 disminuye con el aumento de temperatura. Por tanto, la formación del NO_2 se ve favorecida por las temperaturas bajas, pero el NO_2 se disocia nuevamente a NO a temperaturas más altas. Según la temperatura se eleva por encima de los 1000 °K, la formación del NO_2 se hace cada vez menos probable en condiciones de equilibrio.

T		4 N ₂ /O ₂ (ppm)	40N ₂ /O ₂ (ppm)
(°K)	(°F)		
1200	1700	210	80
1500	2240	1300	500
1800	2780	4400	1650
2000	3140	8000	2950
2200	3500	13100	4800
2400	3860	19800	7000

Tabla F.2. Composición típica del NO a diversas temperaturas para la reacción de equilibrio $\text{N}_2 + \text{O}_2 \leftrightarrow 2\text{NO}$, como una función de composición inicial N_2/O_2 .

$$\text{NO} + \frac{1}{2}\text{O}_2 \leftrightarrow \text{NO}_2 \quad K_p = \frac{p\text{NO}_2}{(p\text{NO})(p\text{O}_2)^{1/2}} \quad \text{Ec. F.3. y F.4}$$



T		K _p
(°K)	(°F)	
300	80	10 ⁶
1000	1340	1,2x10 ²
1200	1700	1,1x10 ⁻¹
1500	2240	1,1x10 ⁻²
2000	3140	3,5x10 ⁻³

Tabla F.3. Constantes de equilibrio para la reacción de oxidación del monóxido de nitrógeno a dióxido de nitrógeno.

En los procesos reales de combustión, las reacciones Rx. F.3 y F.4. ocurren simultáneamente. En la *Tabla F.4.* se muestran las concentraciones de equilibrio, pronosticadas para el NO y el NO₂ en un gas de combustión típico (3,3 % de O₂, 76% de N₂).

T		NO(ppm)	NO ₂ (ppm)
(°K)	(°F)		
300	80	1,1x10 ⁻⁶	3,3x10 ⁻⁵
800	980	0,77	0,11
1400	2060	250	0,87
1873	2912	2000	1,8

Tabla F.4. Concentraciones de equilibrio para el NO y el NO₂.

Con base solamente en estos datos termodinámicos, existirá la situación siguiente para las reacciones globales que incluyen el NO y el NO₂. se formará poco NO o NO₂ a temperatura ambiente. En el rango de 800 °K las cantidades presentes serán todavía despreciables, a pesar de que la cantidad de NO sobrepasa ahora la de NO₂. Ahora bien, a las temperaturas convencionales de combustión (>1500 °K) es posible la formación apreciable de NO, con cantidades despreciables de NO₂ presentes.

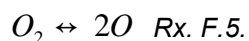
Sin embargo, todos los gases de combustión se enfrían finalmente. La termodinámica pronostica que el gas algo enfriado, cuando realiza el proceso de postcombustión, consistirá principalmente de NO_x en la forma de NO₂.



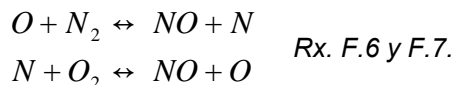
F.4 Cinética de la formación del NO en los procesos de PostCombustión.

Pariendo, como se ha comentado antes, la mayoría del NO_x que se forma durante todo el proceso de combustión lo hace durante las dos primeras etapas; precombustión y combustión, la implicación de la cinética en el proceso de post combustión no será determinante visto desde un punto termodinámico. La aplicación de la cinética química a los procesos que contienen nitrógeno y oxígeno procedentes de aire atmosférico ha ayudado a aludir la estructura del sistema de reacción química, que conduce a la formación de los óxidos de nitrógeno.

El interés que se ha tenido en pronosticar las emisiones de monóxido de nitrógeno de fuentes móviles y estacionarias ha llevado a la formulación de varios modelos analíticos para la formación de NO del nitrógeno atmosférico. El modelo básico actualmente en uso tuvo su origen en los trabajos de Zeldovich hacia 1946. Una vez se hayan formado los átomos de oxígeno por el proceso:



Las reacciones primarias que interesan, según los mecanismos de cadenas de radicales libres de Zeldovich, serán:



Se supone que las reacciones básicas de combustión se equilibran antes del inicio de formación de NO en la zona de poscombustión de las llamas. Otra reacción elemental que se añade frecuentemente a la lista es:



Las reacciones Rx.F.6 y F.7. son, con mucho, las más importantes en términos de la formación de NO en las llamas pobres y moderadamente ricas ($\phi < 1,2$). La reacción Rx.F.6 tiene su importancia en las llamas ricas en combustible para ($\phi \geq 1,2$), donde ϕ es la relación de equivalencia para la mezcla de combustible y aire.

F.4.1 Estudio cualitativo de la cinética del NO.

Se puede efectuar una evaluación cualitativa de la cinética que controla la formación de NO en los procesos de combustión entre los hidrocarburos y el aire. Se considera que la reacción Rx. F.6. es la reacción que controla la formación. La remoción del NO se debe primeramente al reverso de la reacción Rx. F.5.



Las constantes de tasa para estas dos reacciones elementales, para la formación y consumo del NO son:

$$k_4 = 1.4 \times 10^{14} \exp\left(\frac{-315.5}{RT}\right), \text{cm}^3 / \text{g} \cdot \text{mol} \cdot \text{s} \quad \text{Rx. F.9.}$$

$$k_5 = 6.4 \times 10^9 T \exp\left(\frac{-26.15}{RT}\right), \text{cm}^3 / \text{g} \cdot \text{mol} \cdot \text{s} \quad \text{Rx. F.10.}$$

$$k_{-5} = 1.6 \times 10^9 T \exp\left(\frac{-161.5}{RT}\right), \text{cm}^3 / \text{g} \cdot \text{mol} \cdot \text{s} \quad \text{Rx. F.11.}$$

Ambas reacciones poseen grandes energías de activación. Además, la concentración del átomo de O que controla también las tasas de reacción será insignificante a temperaturas bajas. La cinética pronostica una tasa muy baja de formación de NO a temperaturas bajas, y la termodinámica pronostica una concentración baja en el equilibrio.

A temperaturas altas, se formará rápidamente NO si están presentes suficientes átomos de O. Resulta que la concentración de NO aumenta rápidamente ya que la combustión de los hidrocarburos proporciona las condiciones apropiadas para la oxidación del nitrógeno atmosférico.

F.4.2 Estudio cuantitativo de la cinética del NO.

Se puede deducir una ecuación para la tasa de formación del monóxido de nitrógeno, con base en las reacciones elementales. Es de extrema importancia mantener claramente en la mente los mecanismos y suposiciones utilizados en la deducción. Las tasas basadas en diferentes mecanismos para la combustión en la fase gaseosa pueden ser significativamente diferentes. Estas diferencias en las tasas de formación del NO se pueden relacionar directamente con las diferencias en la concentración del átomo de O y con los perfiles de temperatura pronosticados por los varios mecanismos de combustión.

Uno de los enfoques básicos para el pronóstico de las tasas de formación de NO consiste primero en restringir el desarrollo de las reacciones Rx. F.6 y F.7..

La tasa neta de formación del NO por medio de la reacción Rx. F.6 sería:

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_4 [O] \cdot [N_2] - k_{-4} [N] \cdot [NO] \quad \text{Ec. F.5}$$



donde k_4 y k_{-4} son las constantes de la tasa directa e inversa, respectivamente, de la ecuación Rx. F.6. El orden de la reacción con respecto a cada especie se ha tomado como igual a la unidad. En términos de las reacciones Rx. F.6 y F.7, la ecuación de la tasa general para el NO será:

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_4[O] \cdot [N_2] - k_{-4}[N] \cdot [NO] + k_5[N] \cdot [O_2] - k_{-5}[O] \cdot [NO] \quad \text{Ec. F.6}$$

La siguiente etapa consistirá en expresar algunas de las cantidades de la derecha en términos de otras variables.

Primero, se supone que existe una concentración uniforme de átomos de N. Esto constituye un procedimiento bastante normal siempre que una especie esté presente en cantidades muy pequeñas con respecto a la especie principal. Se cumple en los átomos de N en los procesos comunes de combustión, especialmente cuando $(\phi \geq 1,2)$. Para las reacciones Rx. F.6 y F.7 se tienen en general que:

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_4[O] \cdot [N_2] - k_{-4}[N] \cdot [NO] + k_5[NO] \cdot [O] - k_{-5}[N] \cdot [O_2] \quad \text{Ec. F.7}$$

en estado estacionario, $d[N]/dt = 0$. por tanto:

$$[N]_{ss} = \frac{k_4[O] \cdot [N_2] + k_{-5}[NO] \cdot [O]}{k_{-4}[NO] + k_5[O_2]} \quad \text{Ec. F.8}$$

el uso de la ecuación Ec. F.8 en la ecuación Ec. F.7 da, después de la manipulación y cancelación de términos:

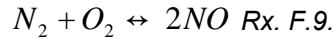
$$\frac{d[NO]}{dt} = 2[O] \cdot \frac{k_4[N_2] - (k_{-4} \cdot k_{-5}[NO]^2 / k_5 \cdot [O_2])}{1 + (k_{-4}[NO] / k_5[O_2])} \quad \text{Ec. F.9}$$

Queda por realizar una simplificación final, si las constantes de equilibrio para las reacciones son K_4 y K_5 , respectivamente Rx. F.6 y F.7., se tiene:

$$K_4 K_5 = \left(\frac{k_4}{k_{-4}} \right) \cdot \left(\frac{k_5}{k_{-5}} \right) = \frac{[NO]^2}{[N_2] \cdot [O_2]} \quad \text{Ec. F.10}$$



donde $K_{p, NO}$ es la constante de equilibrio para la reacción



se conoce con exactitud el valor de $K_{p, NO}$.

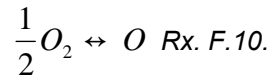
$$K_4 K_5 = \left(\frac{k_4}{k_{-4}} \right) \cdot \left(\frac{k_5}{k_{-5}} \right) = \frac{[NO]^2}{[N_2] \cdot [O_2]} \quad \text{Ec. F.11}$$

La sustitución de la ecuación Ec. F.10 en la ecuación Ec. F.11 conduce a:

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{2k_4[O] \cdot [N_2] - \left\{ 1 - \left(\frac{[NO]^2}{K_{p,NO} [N_2] \cdot [O_2]} \right) \right\}}{1 + (k_{-4}[NO] / k_5[O_2])} \quad \text{Ec. F.12}$$

Este es uno de los formatos posibles de la ecuación de tasa para la formación del monóxido de nitrógeno atmosférico presente en los procesos de combustión.

La determinación del monóxido de nitrógeno formado en cualquier tiempo t se encuentra por la integración de la ecuación Ec. F.12. Por lo general, el valor de $[N_2]$ se fija como equivalente a su valor de equilibrio a la temperatura dada. Además, es necesario deducir una ecuación para $[O]$. Se hace generalmente la suposición de que $[O]$ se puede fijar como igual a su valor de equilibrio $[O_e]$ en los productos calientes de la reacción:



Esta suposición parece ser más válida mientras más caliente sea la llama y más pobre la mezcla. El valor de $[O_e]$ se obtiene de la constante de equilibrio $K_{p,O}$ para la reacción anterior. Por tanto:

$$K_{p,O} = \left(\frac{p_O}{p_{O_2}} \right)^{1/2} = \frac{[O]_e RT}{[O_2]_e^{1/2} (RT)^{1/2}} = \frac{[O]_e (RT)^{1/2}}{[O_2]_e^{1/2}}$$

$$\text{o} \quad [O]_e = \frac{[O_2]_e^{1/2} \cdot K_{p,O}}{(RT)^{1/2}} \quad \text{Ec. F.12}$$

En general es conocida cada cantidad en el lado derecho de la ecuación. Si se utilizan las ecuaciones Ec. F.11 y F.12, se puede escribir la ecuación como:



$$\begin{aligned}
 \frac{dY}{dt} &= \frac{M(1-Y^2)}{2(1+CY)} \\
 M &= \frac{4k_4 K_{p,O} [N_2]^{1/2}}{(RT)^{1/2} (K_{p,NO})^{1/2}} \\
 C &= \frac{k_{-4} (K_{p,NO})^{1/2} [N_2]^{1/2}}{k_2 [O_2]^{1/2}} \\
 Y &= \frac{[NO]}{[NO]_e}
 \end{aligned}
 \tag{Ec. F.13}$$

Si se considera la zona de poscombustión, donde se forma el NO, como una región de temperatura constante, la ecuación Ec. F.13 se puede luego integrar directamente. El resultado será:

$$(1-Y)^{C+1} (1+Y)^{C-1} = \exp(-Mt) \tag{Ec. F.14}$$

Esta ecuación relaciona la fracción de NO formada (Y) con el tiempo t en términos de los parámetros C y M.

Se puede demostrar matemáticamente que la relación entre Y y t no depende en forma marcada de los valores de C que son representativos de las condiciones de combustión después de la llama. M representa un importante parámetro que influye decididamente en la ecuación Ec. F.14. La expresión que define M se puede describir como

$$M = \frac{4k_4 K_{p,O} P^{1/2}}{RT K_{p,NO}} \tag{Ec. F.15}$$

con base en los datos experimentales de k_4 , y los datos de K de las tablas de JANAF, se ha estimado el valor de M como:

$$M = 5,7 \times 10^{15} T^{-1} P^{1/2} \exp\left(\frac{-58400}{T}\right) \tag{Ec. F.16}$$

con M expresada en unidades de segundo⁻¹, P en atmósfera y T en grados kelvin. Hay una gran dependencia de la temperatura. Esto resulta ser extremadamente importante en término no sólo del NO total, sino también de la tasa de formación del monóxido de nitrógeno. La tabla que se presenta a continuación proporciona una lista de valores de M como una función de T.



T		M(s ⁻¹)
(°K)	(°F)	
1800	2780	0.044
2000	3140	0.56
2200	3500	7.27
2400	3860	60.9
2500	4040	154

Tabla F.5. Valores de M en función de la temperatura.

En la ilustración D.3 se muestra un trazado general de la ecuación (D.18). Se ve como C primero tiene poco efecto en $[\text{NO}]/[\text{NO}]_e$ para un M dado. La importancia de M ($\propto T$) es sorprendente. Para temperaturas dentro del intervalo de 2200° a 2400° K se podría formar una apreciable cantidad de NO en menos de 0,1s. Sólo cuando la temperatura es menor de 2000° K se formará una cantidad pequeña de monóxido de nitrógeno después de un intervalo de 1s. Es especialmente importante en las fuentes estacionarias de combustión.

A falta de equilibrio, la cinética de formación es un factor importante. Sólo se confirma en la ilustración siguiente, donde la pendiente de cualquier línea mide la tasa de formación para dicha condición. Para cualquier valor dado de tiempo t, la tasa es significativamente diferente para las diversas temperaturas.

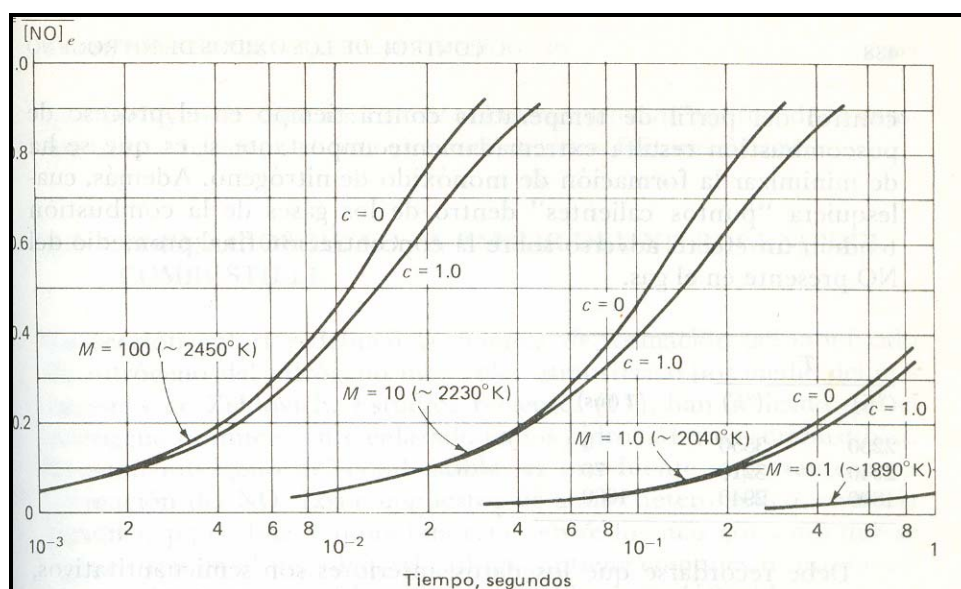


Figura F.3. Formación NO en función del tiempo.



La tabulación que se muestra a continuación presenta una lista de formación, dY/dt para $t=10^{-2}$ s para un valor de C igual a la unidad. Para impedir la última formación de gran concentración de NO, se deberá mantener la tasa de formación tan baja como sea posible. Requiere que la temperatura sea razonablemente baja en la región de la llama.

M	T		DY/dt(s ⁻¹)
	(°K)	(°F)	
1	2040	3210	0.498
10	2230	3550	4.76
100	2450	390	30.25

Tabla F..6. Lista de formación dY/dt para $t=10^{-2}$ s.

Con base en los datos de equilibrio de la tabla y los datos cinéticos de la ilustración *Figura F.1*, se puede estimar el tiempo requerido para alcanzar varios niveles de concentración NO a una temperatura dada. Los resultados de esta estimación se resumen en la *Figura F.4*.

Al tratarse de una gráfica log, el aumento rápido del monóxido de nitrógeno para llegar al nivel de equilibrio resulta aparente a temperaturas elevadas. La tabla que se muestra a continuación resume datos tomados de la *Figura F.4.*, para un valor de C igual a la unidad. Es obvio el drástico efecto de la temperatura en el tiempo necesario para alcanzar el nivel de NO dado. Por lo tanto el control del perfil de temperatura contra tiempo en el proceso de poscombustión resulta extremadamente importante si ha de minimizarse la formación de monóxido de nitrógeno.

T		M(s ⁻¹)
(°K)	(°F)	
2230	3550	4
2040	3210	70
1890	2940	1000

Tabla F.7. Datos tomados de la figura para C igual a 1.



Estos datos son semicuantitativos, basados en las suposiciones principales:

- Las reacciones *Rx. F.6* y *F.7.* son las etapas elementales que controlan la formación del monóxido de nitrógeno.
- La temperatura permanece constante en la región posterior a la llama.
- La composición inicial es una razón de 40:1 de sólo nitrógeno y oxígeno moleculares, respectivamente.

Con respecto a la primera suposición, se incluye la *Ec. F.10* en el mecanismo para las mezclas ricas en combustible. Se supone una temperatura fija a fin de generar las curvas generalizadas de la ilustración *Figura F.3* y *F.4.* En la realidad, la temperatura podrá disminuir como resultado de la transferencia de calor o de los efectos de dilución. Así que la verdadera composición final de NO depende mucho del perfil de temperatura contra tiempo en los gases de poscombustión. Los métodos de control de la combustión se basan en el conocimiento de estos factores básicos.

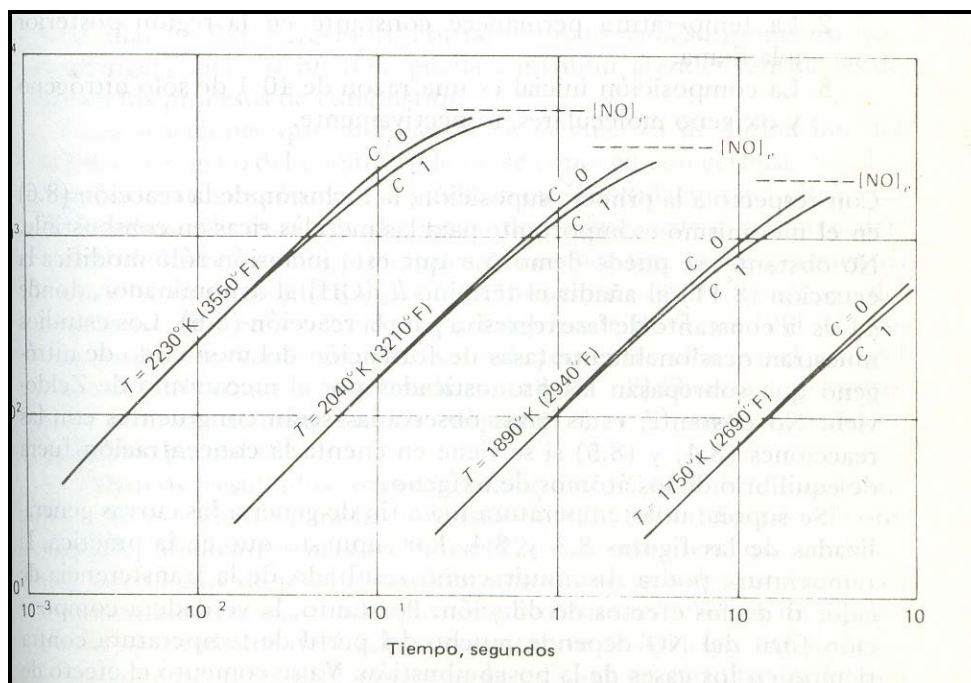


Figura F.4. Formación NO en función de la temperatura. [26]





ANEXO G – Selección del Modelo

INDEX:

G.	Selección del modelo	70
G.1	Descripción y Limitaciones	70
G.2	Formación del NOx Térmico.....	70
G.2.1	La casi estable asunción para [N]	71
G.2.2	Sensibilidad del NOx térmico a la temperatura	71
G.2.3	Determinando la concentración de radicales O.....	72
G.2.4	Determinando la Concentración de Radicales OH	73
G.3	Formación del NOx puntual.....	74
G.3.1	NOx puntual: Donde y cuando se forma	75
G.3.2	Mecanismo del NOx puntual	75
G.3.3	Factores de formación de NOx puntual.....	76
G.3.4	Reacción primaria.....	76





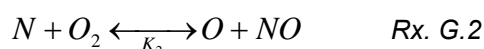
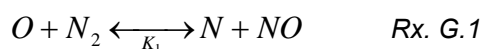
G. Selección del modelo

G.1 Descripción y Limitaciones

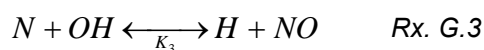
Las emisiones de NOx están formadas en su mayor parte de monóxido de nitrógeno NO y en menor medida podemos encontrar dióxido de nitrógeno NO₂ y óxido nitroso N₂O. El NOx es un precursor de la niebla fotoquímica, contribuye a la lluvia ácida y es causa del desgaste del ozono. Así pues, las emisiones NOx son un contaminante.

G.2 Formación del NOx Térmico

La formación del NOx térmico está determinada por un conjunto de reacciones químicas dependientes de altas temperaturas conocido como mecanismo de Zeldovich. Las principales reacciones que gobiernan la formación del NOx Térmico son:



Una tercera reacción se ha demostrado que contribuye, particularmente en condiciones cercanas de estequiometría y en mezclas ricas de combustibles:



El valor de las constantes de estas reacciones ha sido medido en numerosos estudios experimentales, y los datos obtenidos de estos estudios han sido evaluados por Baulc y Hanson y Salimian. Las expresiones para los valores de los coeficientes de las reacciones Rx. G.1, G.2 y G.3 usados en el modelo NOx se muestran a continuación. Estas reacciones fueron seleccionadas basándose en las evaluaciones de Hanson y Salimian.

$$K_1 = 18 \cdot 10^8 e^{-38870/T} \quad \text{Ec. G.1}$$

$$K_{-1} = 38 \cdot 10^7 e^{-425/T} \quad \text{Ec. G.2}$$

$$K_2 = 18 \cdot 10^4 e^{-4680/T} \quad \text{Ec. G.3}$$

$$K_{-2} = 38 \cdot 10^3 e^{-20820/T} \quad \text{Ec. G.4}$$

$$K_3 = 71 \cdot 10^7 e^{-450/T} \quad \text{Ec. G.5}$$



$$K_{-3} = 17 \cdot 10^8 e^{-24560/T} \quad \text{Ec. G.6}$$

En las expresiones superiores, K_1 , K_2 , y K_3 son los datos de las constantes para las reacciones Rx. G.1, G.2 y G.2, respectivamente y K_{-1} , K_{-2} , y K_{-3} son los correspondientes datos opuestos. Estos valores tienen como unidades de $\text{m}^3/\text{gmol}\cdot\text{s}$.

La formación de NO en la red mediante las reacciones Rx. G.1, G.2 y G.2 viene dada por:

$$\frac{d[NO]}{dt} = K_1[O][N_2] + K_2[N][O_2] + K_3[N][OH] - K_{-1}[NO][N] - K_{-2}[NO][O] - K_{-3}[NO][H] \quad \text{Ec. G.6}$$

donde todas las concentraciones tienen unidades de gmol/m .

Para calcular los porcentajes de formación de NO y N, son necesarias las concentraciones de O, H y OH.

G.2.1 La casi estable asunción para [N]

El porcentaje de formación de NOx es solo significativo a altas temperaturas (mayores a 1800K) porque la fijación del nitrógeno requiere romper la fuerte triple unión (energía de disociación de 941 KJ/gmol). Este efecto está representado por la alta energía de activación de la reacción Rx. G.1, la cual hace de límite de porcentaje del mecanismo extendido de Zeldovich.

De todas maneras, la energía de activación para la oxidación de los átomos de N es pequeña. Cuando hay suficiente oxígeno, como en una llama de combustible, el porcentaje de consumo de átomos de nitrógeno libre pasa a ser igual al porcentaje de formación y así se establece un estado casi estable. Esta asunción es válida para la mayoría de los casos de combustión excepto en los casos de los combustibles extremadamente ricos. De ahí que el porcentaje de formación se transforme en:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2K_1[O][N_2] \frac{\left(1 - \frac{K_{-1}K_{-2}[NO]^2}{K_1[N_2]K_2[O_2]}\right)}{\left(1 + \frac{K_{-1}[NO]}{K_2[O_2]K_3[OH]}\right)} \quad (\text{gmol} / \text{m}^3 \text{s}) \quad \text{Ec. G.7}$$

G.2.2 Sensibilidad del NOx térmico a la temperatura

De la ecuación Ec. G.7 se deduce claramente que la formación de NO aumentará en el caso de un incremento de la concentración de oxígeno. También aparece que la formación de NO debería ser muy dependiente de la temperatura pero



independiente del tipo de combustible. De hecho, basándonos en la limitación descrita por la ecuación Ec. G.2, la producción de NO_x térmico se duplica por cada 90 K de temperatura aumentados a partir de los 2200K.

G.2.3 Determinando la concentración de radicales O

Se realizó un pequeño estudio detallado de la concentración de radicales en las llamas turbulentas industriales, pero el trabajo ha demostrado la existencia de este fenómeno en llamas turbulentas de difusión. Actualmente no hay ninguna conclusión definitiva del efecto del equilibrio parcial en los porcentajes de formación de NO_x en llamas turbulentas. Peters y Donnerhack sugieren que el equilibrio parcial de radicales puede contar en no más de un incremento del 25% en el NO_x térmico y que los fluidos dinámicos tienen un efecto dominante en la formación de NO_x. Bilger sugiere que en las llamas turbulentas de difusión, el efecto de los átomos de O sobre la formación de NO_x es muy importante.

Para llegar a suplir esta falta de precisión, una aproximación sería juntar el mecanismo extendido de Zeldovich con un detallado mecanismo de combustión de hidrocarburos involucrando muchas reacciones, especies y pasos. Esta aproximación ha sido usada anteriormente para la investigación. De todas maneras, el largo proceso de computación ha hecho el método económicamente poco atractivo y una compleja extensión a los flujos turbulentos.

Para determinar la concentración de radicales O, se utilizará una de las tres aproximaciones (aproximación del equilibrio, aproximación del equilibrio parcial y la aproximación por predicción de las concentraciones) en reconocimiento de la controversia en curso discutida en párrafos anteriores.

- **Método 1: Aproximación por Equilibrio.**

La cinética de la formación de los porcentajes de NO_x térmico son más lentas que los porcentajes de oxidación de hidrocarburos, y por ello la mayor parte de NO_x se forma tras completar la combustión. Así, el proceso de formación de NO_x puede separarse a menudo del mecanismo de combustión principal y el porcentaje de formación de NO_x puede calcularse asumiendo el equilibrio de las reacciones de combustión. Usando esta aproximación, el cálculo de formación de NO_x se simplifica considerablemente. La asunción de equilibrio está justificada por la reducción de los radicales más allá de la temperatura más alta de la llama. Según Westenberg, el equilibrio de la concentración de átomos de O puede ser obtenida de la expresión



$$[O] = K_p [O_2]^{1/2} \quad \text{Ec. G .8}$$

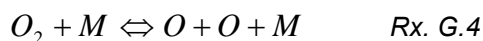
Incluyendo la temperatura en esta expresión, ésta se transforma en:

$$[O] = 3'97 \cdot 10^5 T^{-1/2} [O_2]^{1/2} e^{-31090/T} \quad \text{Ec. G .9}$$

donde la temperatura está en grados Kelvin

- **Método2: Aproximación por Equilibrio Parcial.**

Una mejora del método 1 puede hacerse contando un tercer grupo de reacciones en recombinación-disociación del proceso de O:



La ecuación Rx. G.4 se substituye por la siguiente expresión:

$$[O] = 36'64 \cdot T^{1/2} [O_2]^{1/2} e^{-27123/T} \quad \text{Ec. G .10}$$

ésta generalmente nos lleva a una mayor concentración parcial de los átomos de Oxígeno.

- **Método 3: Aproximación por predicción de O.**

Cuando la concentración de átomos de O está bien predicha usando un modelo avanzado de química (como podría ser el sub-modelo flamelet del modelo previo a la mezcla), la concentración de puede ser obtenido simplemente de las fracciones másicas de las especies locales de O.

G.2.4 Determinando la Concentración de Radicales OH

Se utilizará una de las tres aproximaciones siguientes para determinar la concentración de radicales OH: la exclusión de OH del cálculo de aproximación del NOx térmico, el del equilibrio parcial, y el uso de la predicción de la cantidad de concentración de OH.

- **Método 1: Aproximación por exclusión de OH**

En este método, la tercera reacción en el método extendido del mecanismo de Zeldovich se considera negligible ya que:

$$K_2 [O_2]_{eq} \gg K_3 [OH]_{eq} \quad \text{Ec. G .11}$$



Esta asunción está justificada para condiciones de combustibles ligeros e incluso se puede asumir en la mayoría de los casos.

- **Método 2: Aproximación por Equilibrio Parcial**

En esta aproximación la concentración de OH en la tercera reacción en el mecanismo extendido de Zeldovich Rx. G.2 viene dada por:

$$[OH] = 2'129 \cdot 10^2 T^{-0'57} e^{-4595/T} [O]^{1/2} [H_2O]^{1/2} \quad \text{Ec. G .12}$$

- **Método 3: Aproximación por predicción de OH**

Tal y como ocurre en el método de predicción de O, cuando la concentración de radicales OH está bien predicha usando un avanzado modelo de química como el modelo flamelet, [OH] se puede coger directamente de las fracciones másicas de las especies locales de OH.

La elección del modelo óptimo para el cálculo de la concentración de radicales libres OH se basa en lo siguiente: los porcentajes de formación de NOx térmico se predicen por la ecuación Ec. G .7.

La concentración de átomos de O necesaria en esta ecuación se calcula mediante la ecuación Ec. G .9 por la asunción de equilibrio, usando la ecuación Ec. G .10 para la asunción de equilibrio parcial o bien usando las fracciones másicas de O.

Se podrá escoger que aproximación se desea realizar durante la inicialización del problema. En términos de la ecuación de transporte de NO Rx. G.1 el término de la fuente de NO debido al mecanismo de NOx térmico es

$$S_{\text{térmico}, NO} = M_{W, NO} \frac{d[NO]}{dt} \quad \text{Ec. G .12}$$

donde $M_{W, NO}$ es el peso molecular del NO

y $\frac{d[NO]}{dt}$ se calcula mediante la ecuación G .7.

G.3 Formación del NOx puntual

Se sabe que durante la combustión de combustibles basados en hidrocarburos, los porcentajes de formación de NOx pueden exceder del producido directamente de la oxidación de las moléculas de nitrógeno (ejemplo NOx térmico)



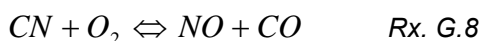
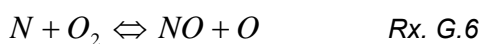
G.3.1 NOx puntual: Donde y cuando se forma

La presencia de un segundo mecanismo involucrado en la formación de NOx fue identificada por Fenimore y fue dada a conocer con el nombre de “prompt NOx” o NOx puntual. Hay evidencias considerables de que una cantidad significativa de NOx puntual puede ser producido en algunos ambientes de combustión, tales como bajas temperaturas, combustibles ricos y cuando los tiempos de residencia son cortos. Los quemadores de superficie, los sistemas de combustión por etapas y las turbinas de gas pueden crear tales condiciones.

En la actualidad la contribución del NOx puntual al total del NOx procedente de quemadores estacionarios es pequeña. De todas maneras, a medida que las emisiones de NOx se reducen a niveles muy bajos empleando nuevas estrategias (diseño de quemadores o modificaciones de la geometría de los hornos), se espera que la relativa importancia del NOx puntual aumente.

G.3.2 Mecanismo del NOx puntual

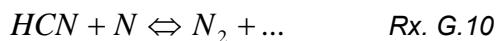
El NOx puntual prevalece en combustiones ricas en oxígeno. La formación real está formada por una compleja serie de reacciones y muchas posibles especies intermedias. La ruta aceptada es la siguiente:



Un número de especies resultantes de la fragmentación del combustible han sido sugeridas como la fuente del NOx puntual en llamas hidrocarbonadas (ej. CH, CH₂, C), pero la mayor contribución viene dada por el CH Rx. G.5 y CH₂:



Los productos de estas reacciones pueden llevar a la formación de compuestos aminos y ciano que consecuentemente reaccionan para formar NO mediante reacciones similares a las ocurridas en la oxidación de combustible de nitrógeno, por ejemplo:



G.3.3 Factores de formación de NOx puntual

La formación de NOx puntual es proporcional al número de átomos de carbono presentes por unidad de volumen y es independiente de la identidad del hidrocarburo original. La cantidad de HCN formada aumenta con la concentración de radicales de hidrocarburos, los cuales en su momento se incrementan en una proporción equivalente. A medida que la proporción de equivalencia aumenta, la producción de NOx puntual también aumenta, después llega a un pico y finalmente decrece debido a una deficiencia de oxígeno.

G.3.4 Reacción primaria

La reacción Rx. G.5 es de una importancia capital. En estudios recientes, la comparación de las distribuciones para las localizaciones de los picos de NOx con los obtenidos para los picos de CH han mostrado una cercana correspondencia., indicando que la mayoría de NOx en la llama base es NOx puntual formado por la reacción de CH. Asumiendo que la reacción Rx. G.5 controla los porcentajes en la formación de NOx,

$$\frac{d[NO]}{dt} = K_0 [CH] [N_2] \quad Ec. G.12$$





ANEXO H – ESTUDIO DEL IMPACTO AMBIENTAL

INDEX:

H.1	METODOLOGÍA DE EVALUACIÓN DE IMPACTOS.....	80
H.1.1	Valoración de impactos	80
H.1.2	Persistencia del impacto.....	82
H.1.3	Reversibilidad del impacto.....	82
H.1.4	Sinergias.....	83
H.1.5	Acumulación del impacto.....	84
H.1.6	Periodicidad del impacto	84
H.1.7	Recuperabilidad.....	85
H.2	Emisiones a la atmósfera	85
H.2.1	Método: modelo gaussiano de dispersión.	86
H.2.2	Estimación de la elevación del penacho	88
H.2.3	Factores que influyen en la dispersión del penacho	90
H.2.4	Coeficientes de dispersión	91
H.3	Impacto sobre la población más cercana.....	93





H. IMPACTO AMBIENTAL

H.1 METODOLOGÍA DE EVALUACIÓN DE IMPACTOS

La identificación de impactos supone:

- Describir justificadamente el impacto eventualmente producido por las acciones de proyecto sobre el elemento considerado.
- Diferenciar el signo global del impacto producido (POSITIVO ó NEGATIVO).
- Establecer un desbaste inicial justificado dentro de los impactos NEGATIVOS en función de su grado de significación global. De esta forma, se segregan aquellos impactos NO SIGNIFICATIVOS que por razones obvias no resulten determinantes para el desarrollo del Estudio, con el objeto de que no enmascaren los auténticos problemas ambientales (IMPACTOS SIGNIFICATIVOS) que pueda conllevar la ejecución del mismo.

H.1.1 Valoración de impactos

La valoración de los impactos identificados será realizada en los términos que define la legislación vigente sobre E.I.A., diferenciando cuatro niveles de gravedad que de menor la mayor intensidad son los siguientes: compatible, moderado, severo y crítico.

Desde el punto de vista metodológico, la valoración será efectuada cualitativamente, analizando por separado la magnitud y la importancia del impacto y estableciendo a continuación un valor global para la gravedad del mismo.

La magnitud del impacto trata de definir la dimensión del mismo, es decir, el grado de incidencia de la(s) acción(es) de proyecto sobre el factor ambiental o elemento del medio afectado, en el ámbito específico en el que actúa. Se establecerán CUATRO niveles de magnitud del impacto: MUY ALTA, ALTA, MEDIA y BAJA.

La importancia se define como la trascendencia o significación del impacto y su determinación se ha basado en la consideración simultánea aunque independiente del carácter del mismo y de la calidad intrínseca del elemento del medio al que afecta.



La estimación de la gravedad se realiza en base al grado de intensidad de las medidas correctoras que se necesitan para corregir el impacto, para lo que a su vez se considera de forma simultánea pero independiente el valor de la magnitud y de la importancia del impacto.

H.1.1.1 Extensión del impacto

Este aspecto hace referencia al área de influencia teórica del impacto en relación con el entorno del Proyecto (% de área respecto al entorno en que se manifiesta el efecto).

Escala de valoración de la extensión del impacto:

Grado	Definición
Puntual	Efecto localizado.
Parcial	Efecto con incidencia en parte del entorno de la c.t.c.c.
Extenso	Efecto con incidencia en la mayor parte del entorno.
Total	Efecto con influencia generalizada en el entorno.

Tabla G.1. Tipos de grados de valoración de impacto.

H.1.1.2 Momento del impacto

Considerando el tiempo que transcurre entre el inicio de la producción de energía en la c.t.c.c. (t_0) y la manifestación del efecto inducido por ella (t_i) en el elemento del medio afectado, se distinguen los siguientes plazos:

Escala de valoración del momento de impacto	
Grado	Definición
Inmediato	$t_i - t_0$ aproximadamente igual a cero.
Corto plazo	$t_i - t_0$ es inferior a un año.



Medio plazo	$t_i - t_0$ está comprendido entre 1 y 5 años.
Largo plazo	$t_i - t_0$ es superior a 5 años.

Tabla G.2. Escala de valoración del momento de impacto.

H.1.2 Persistencia del impacto

La persistencia hace referencia al tiempo que, supuestamente, permanecerá el efecto desde su aparición y a partir del cual el factor afectado retornaría a las condiciones iniciales previas a la acción, si definimos acción como inicio de la producción eléctrica en la c.t.c.c. por medios naturales o mediante la introducción de medidas correctoras. Se valora en relación al tiempo que tardará el factor afectado en retornar a las condiciones preoperacionales.

La persistencia es independiente de la reversibilidad. De menor a mayor persistencia, se distinguen los siguientes grados:

Escala de valoración de la reversibilidad del impacto	
Grado	Definición
Fugaz	El efecto desaparece en cuestión de días.
Temporal (Corto o largo plazo)	Corto plazo: Persiste unos meses.
	Largo plazo: Persiste unos años. ($t < 10$)
Permanente	Persistencia superior a 10 años.

Tabla G.3. Escala de valoración de la reversibilidad del impacto.

H.1.3 Reversibilidad del impacto

Se refiere a la posibilidad de reconstrucción del factor afectado por la c.t.c.c, es decir, de retornar a las condiciones preoperacionales por medios naturales, una vez que la acción de la c.t.c.c. deja de actuar sobre el medio. De mayor a menor reversibilidad se distinguen las siguientes posibilidades:



Escala de valoración de la persistencia del impacto	
Grado	Definición
Corto plazo	Reversible en cuestión de días o semanas.
Medio plazo	Reversible en cuestión de meses.
Largo plazo	Reversible a largo plazo (en <10 años)
Irreversible	Irreversible o reversible después de transcurridos 10 años.

Tabla G.4. Escala de valoración de la persistencia del impacto.

H.1.4 Sinergias

Este atributo contempla el reforzamiento de dos ó más efectos simples. La componente total de la manifestación de los efectos simples, provocados por acciones que actúan simultáneamente, es superior a la que cabría esperar de la manifestación de efectos cuando las acciones que las provocan actúan de manera independiente o no simultánea.

Las posibles situaciones se reflejan a continuación de más a menos favorables:

Escala de valoración de las posibles sinergias entre impactos	
Grado	Definición
No sinérgicos	El impacto no se ve reforzado por la concurrencia de otras acciones.
Moderada o Acusadamente sinérgico	El impacto se ve moderadamente/acusadamente reforzado por la concurrencia de dos o más acciones de proyecto.
Altamente sinérgicos	El impacto se ve altamente reforzado por la concurrencia de dos ó más acciones de proyecto.

Tabla G.5. Escala de valoración de posibles sinergias entre impactos.



H.1.5 Acumulación del impacto

Este atributo informa sobre el incremento progresivo de la manifestación del efecto, cuando persiste de forma continuada o reiterada la acción que lo genera. La gradación de posibilidades que se contemplan aparece en la siguiente tabla, reflejadas de más a menos favorables.

Escala de valoración de acumulación de impacto	
Grado	Definición
Efecto no acumulativo	La acción no produce efectos acumulativos.
Efecto acumulativo	La acción produce efectos acumulativos con otras acciones.

Tabla G.6. Escala de valoración de acumulación de impacto.

H.1.6 Periodicidad del impacto

La periodicidad se refiere a la regularidad de manifestación del efecto. Se distinguen las siguientes posibilidades:

Escala de valoración de acumulación de impacto	
Grado	Definición
Discontinuo	El efecto se manifiesta de forma discontinua en el tiempo.
Periódico	El efecto se manifiesta de forma cíclica o recurrente en el tiempo.
Irregular	El efecto se manifiesta de forma impredecible en el tiempo (ofrecerá mayor o menor gravedad en función del período de recurrencia).
Continuo	El efecto se manifiesta de forma continua en el tiempo.

Tabla G.7. Escala de valoración de acumulación de impacto.



H.1.7 Recuperabilidad

Se refiere a la posibilidad de reconstrucción total o parcial del factor afectado como consecuencia de la construcción de la C.T.C.C., es decir, la posibilidad de retornar a las condiciones pre-operacionales por medio de la intervención humana (introducción de las medidas correctoras especificadas en la memoria de este proyecto).

Los distintos grados de recuperabilidad de un impacto se reflejan a continuación de mayor a menor.

Escala de valoración de acumulación de impacto	
Grado	Definición
Inmediatamente recuperable	Efecto totalmente recuperable de forma inmediata.
Recuperable a medio plazo	Efecto totalmente recuperable a medio plazo.
Mitigable	Efecto parcialmente recuperable o irrecuperable pero con posibilidad de introducir medidas compensatorias.
Irrecuperable	Alteración imposible de reparar tanto por la acción natural como por la humana.

Tabla G.8. Escala de valoración de acumulación de impacto.

H.2 Emisiones a la atmósfera

Estas centrales suelen presentarse como tecnologías limpias debido a la reducción de las emisiones de contaminantes que en ellas se consiguen. Se alude en primer término al vertido casi nulo de Dióxido de Azufre (SO₂) debido a que este elemento (S) es prácticamente inexistente en el gas natural. Y se insiste mucho en las reducciones que comportaba en las emisiones de Dióxido de Carbono (CO₂) por kWh producido, con el consiguiente alivio del efecto invernadero. Se omite señalar que nuestro país ya superó



en el año 1999 los límites fijados para el 2010 por el compromiso firmado en *Kioto* de emisión de gases de invernadero, y que la producción de electricidad ha sido, y muy probablemente seguirá siendo, uno de los responsables de este crecimiento.

Este crecimiento desbocado se ha debido en buena medida a la fuerte reducción de los precios de la electricidad. Desde 1996 dichos precios han bajado en términos reales más del 23% en los clientes sometidos a tarifa (pequeños consumidores) y más del 28% para los que negocian directamente el precio del kWh. Debido a dicho abaratamiento y a la existencia de una etapa de fuerte crecimiento económico la demanda de electricidad ha crecido a tasas de más del 6% en este período. Algo desconocido desde los 70. Un objetivo político de primer orden del gobierno ha sido trasladar a los precios finales de la energía la profunda reducción que se había operado en los costes. Con ello reducía de forma significativa la inflación y ganaba votos.

En bastantes de estos sitios se están superando los límites establecidos cuando las condiciones meteorológicas facilitan su formación (elevada insolación y temperatura). No es nada aventurado suponer que el caudal de emisión que representa la planta agravará de forma significativa el fenómeno hasta convertirlo en un problema grave de difícil o imposible control. Se provocarán con ello daños significativos sobre la salud de quienes allí habitan. Para ello, se propone el cálculo del impacto ambiental sobre una población cercana.

H.2.1 Método: modelo gaussiano de dispersión.

El modelo de la columna de humo gaussiana se basa en las siguientes hipótesis:

- La columna de humo emitida por la chimenea se eleva hasta cierta altura efectiva, H , que es la suma de la altura de la chimenea, h , más el ascenso, Δh , debido al momento inicial del humo así como a la diferencia de temperaturas entre el gas saliente y el aire que le rodea.
- A partir de H_{ef} la columna de humo se mueve horizontalmente en la dirección del viento (dirección x) con velocidad u y se dispersa en las direcciones



perpendiculares a éste, y y z . (y = horizontal, z = vertical). La dispersión en el plano yz se debe principalmente a la turbulencia atmosférica y puede calcularse como una distribución gaussiana

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2 \cdot \pi \cdot u \cdot \sigma_y \cdot \sigma_z} \exp \left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} \right) \quad \text{Ec.G.1.}$$

donde $C(x,y,z)$ es la concentración, Q es la cantidad de contaminante emitido por unidad de tiempo (g s⁻¹), u es la velocidad del viento y σ_y y σ_z son coeficientes de dispersión

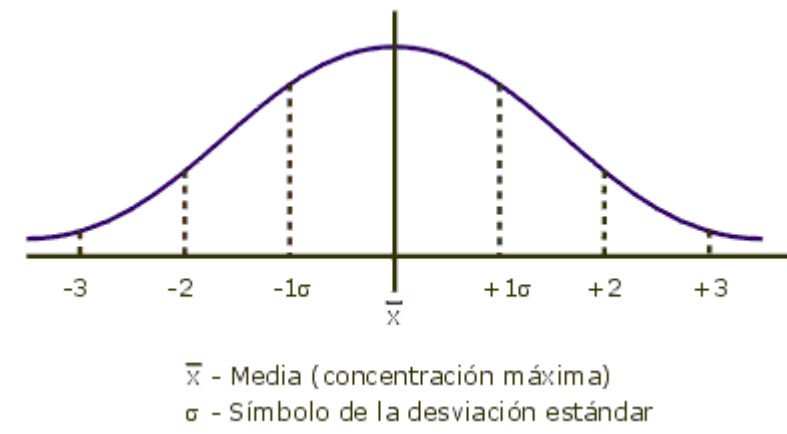


Figura G.1.

Los coeficientes de dispersión vertical se calculan según fórmulas empíricas. Una de ellas son las dadas por Griffiths. Estas fórmulas suelen estar implementadas en los programas informáticos de modelos de dispersión que se utilizan habitualmente y son función de la clase de estabilidad atmosférica.

Esta se representa por un código alfabético que va desde la A (más inestable) hasta la F (más estable). La clase de estabilidad atmosférica se puede deducir para cada condición meteorológica a partir de la siguiente tabla:



$U_{10}(m/s)$	Radiación solar				
	Día			Noche	
	Fuerte	Moderadas	Débil	Nubes $> \frac{1}{2}$	Nubes $< \frac{3}{8}$
<2	A	A-B	B		
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	D	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

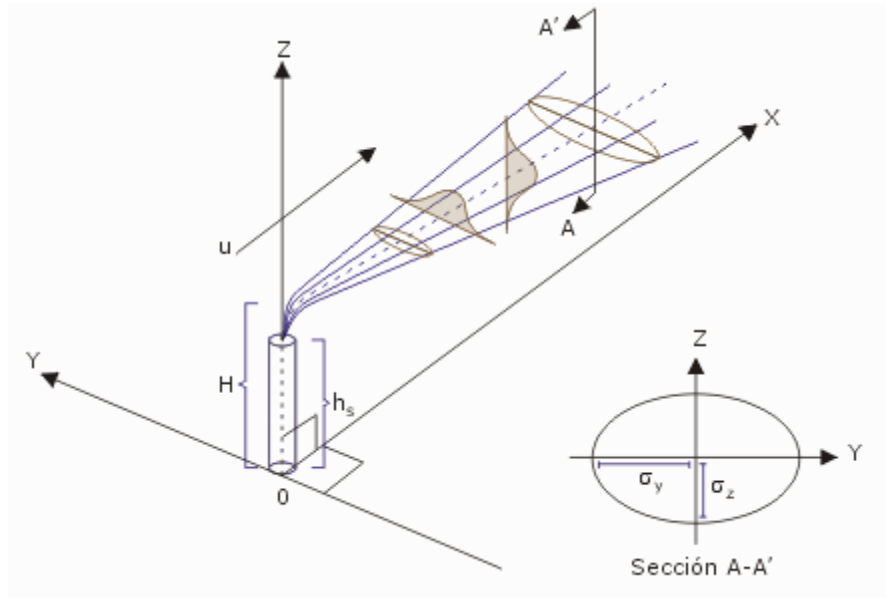
Tabla G.9. Condiciones meteorológicas que definen las clases de estabilidad de Pasquill

H.2.2 Estimación de la elevación del penacho

La elevación del penacho (Δh) se define como la diferencia entre la altura de la línea central final del penacho y la altura inicial de la fuente. Esta elevación está originada por la fuerza ascensional y el impulso vertical del efluente.

La temperatura de salida del efluente en el caso de que supere en más de 50°C la temperatura ambiental, tiene mayor influencia que el impulso vertical en la determinación de la altura que alcanzará el penacho.



**Figura G.2.**

Como regla general la elevación del penacho es directamente proporcional al contenido calorífico del efluente y a la velocidad de salida del mismo, e inversamente proporcional a la velocidad local del viento.

Una de las fórmulas más empleadas para el cálculo de esta elevación es la de Holland:

$$\Delta h = \phi_{chimenea} \left(\frac{u_{humo}}{\bar{u}} \right)^{1,4} \left(\frac{T_s - T_{amb}}{T_s} \right) \quad \text{Ec.G.2.}$$

siendo:

Δh = Elevación del penacho por encima de la fuente emisora (m)

$\phi_{chimenea}$ = Diámetro interior del conducto de emisión (m)

u_{humo} = Velocidad del humo (m/s)

\bar{u} = Velocidad media del viento (m/s)

T_s = Temperatura del contaminante (K)



T_a = Temperatura ambiente atmosférica (K)

Los valores de Δh obtenidos con esta fórmula deben corregirse mediante la tabla siguiente, multiplicando por un factor, establecido por *Pasquill-Gifford-Turner*, que es función de las condiciones meteorológicas, que se describen más adelante.

Categorías de estabilidad (clases)	Factor de corrección aplicado al Δh
A-B	1,15
C	1,10
D	1,00
E-F	0,85

Tabla G.10. Factores de corrección de Δh .

H.2.3 Factores que influyen en la dispersión del penacho

Las condiciones meteorológicas y la duración del escape tienen una gran importancia en el alcance de la dispersión del penacho. Los factores principales son: la velocidad del viento y la estabilidad atmosférica.

La estabilidad atmosférica viene definida en función del gradiente vertical de temperatura de las capas del aire.

Los datos de velocidad del viento y estabilidad atmosférica, siempre que sea posible, deben obtenerse de estaciones meteorológicas locales. Dado que no siempre es posible disponer de esta información, a través de la *tabla G.9*, establecida por Pasquill puede obtenerse la categoría de estabilidad atmosférica estimada según las condiciones de insolación y velocidad del viento.

La velocidad del viento se acostumbra a medir a 10 metros de altura. Esta velocidad, a niveles más bajos de 10 metros, se ve reducida notablemente debido a los efectos de rozamiento. Para niveles distintos de este valor, la velocidad del viento debe corregirse según la relación



$$U_w = U_{10} \left(\frac{z}{10} \right)^p \quad \text{Ec.G.3.}$$

siendo:

u_z = Velocidad del viento a la altura de la fuente emisora (m/s)

u_{10} = Velocidad del viento a la altura de 10 m (m/s)

z = Altura de la fuente emisora (m)

p = Coeficiente exponencial

Los valores de p son función de la estabilidad atmosférica y la rugosidad del suelo.

En la tabla siguiente se presentan tales valores.

Estabilidad	Coeficiente exponencial atmosférico (p)	
	<i>Urbano</i>	<i>Rural</i>
A	0,15	0,07
B	0,15	0,07
C	0,20	0,10
D	0,25	0,15
E	0,40	0,35
F	0,60	0,55

Tabla G.11. Coeficientes de corrección de la velocidad del viento .

H.2.4 Coeficientes de dispersión

En la *ecuación G.1.*, los parámetros σ_y y σ_z son las desviaciones tipo en las direcciones lateral y vertical respectivamente, que representan una medida de la dispersión del penacho en dichas direcciones. Tales parámetros son función de la distancia a la fuente



emisora viento abajo y de la clase (categoría) de estabilidad atmosférica definida en el *Tabla G.9*.

Estos coeficientes se suelen presentar en forma gráfica o pueden calcularse según fórmulas empíricas. Diferentes autores llegan a expresiones que difieren ligeramente.

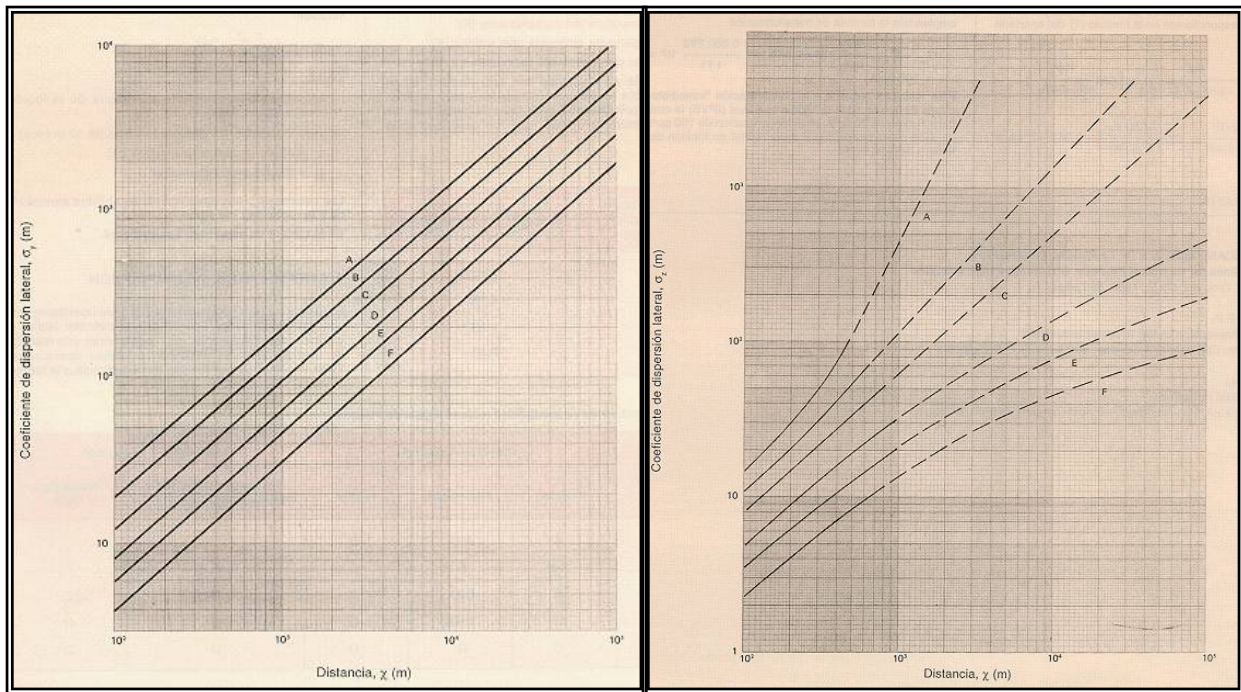


Figura G.3. Coeficiente de dispersión lateral y vertical según distancia y categoría de estabilidad atmosférica.

En la *figura G.3*, se muestran unos gráficos ampliamente utilizados para obtener las σ_y y σ_z , obtenidos a partir de las fórmulas de Turner. Estos gráficos indican que para una determinada distancia viento abajo de la fuente de emisión, la amplitud del penacho es máxima cuando la inestabilidad atmosférica es también máxima y es mínima cuando la atmósfera es muy estable.

Los cálculos de estos parámetros se realizarán según las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}\sigma_y &= a \cdot x^b \\ \sigma_z &= c \cdot x^d\end{aligned}\quad \text{Ec.G .4.}$$

Se pueden calcular ambos coeficientes, dependiendo directamente de la estabilidad atmosférica, mediante los datos de la tabla siguiente:



Clase de estabilidad atmosférica	a	b	c	d
A	0,527	0,865	0,280	0,900
B	0,371	0,866	0,230	0,850
C	0,209	0,897	0,220	0,800
D	0,128	0,905	0,200	0,760
E	0,098	0,902	0,150	0,730
F	0,065	0,902	0,120	0,670

Tabla G.12. Valor de a,b,c y d en función de la estabilidad atmosférica

para la rugosidad (z_o) de 0,10 y alturas inferiores a 20m.

Los valores obtenidos por estos gráficos o por las fórmulas que han dado lugar a ellos, solamente son aplicables en campo abierto y debe tenerse en cuenta que en condiciones inestables (A) y estables (F) se pueden cometer errores de varias veces en la estimación de σ_z .

H.3 Condiciones meteorológicas medias anuales de la estación meteorológica de Badalona.

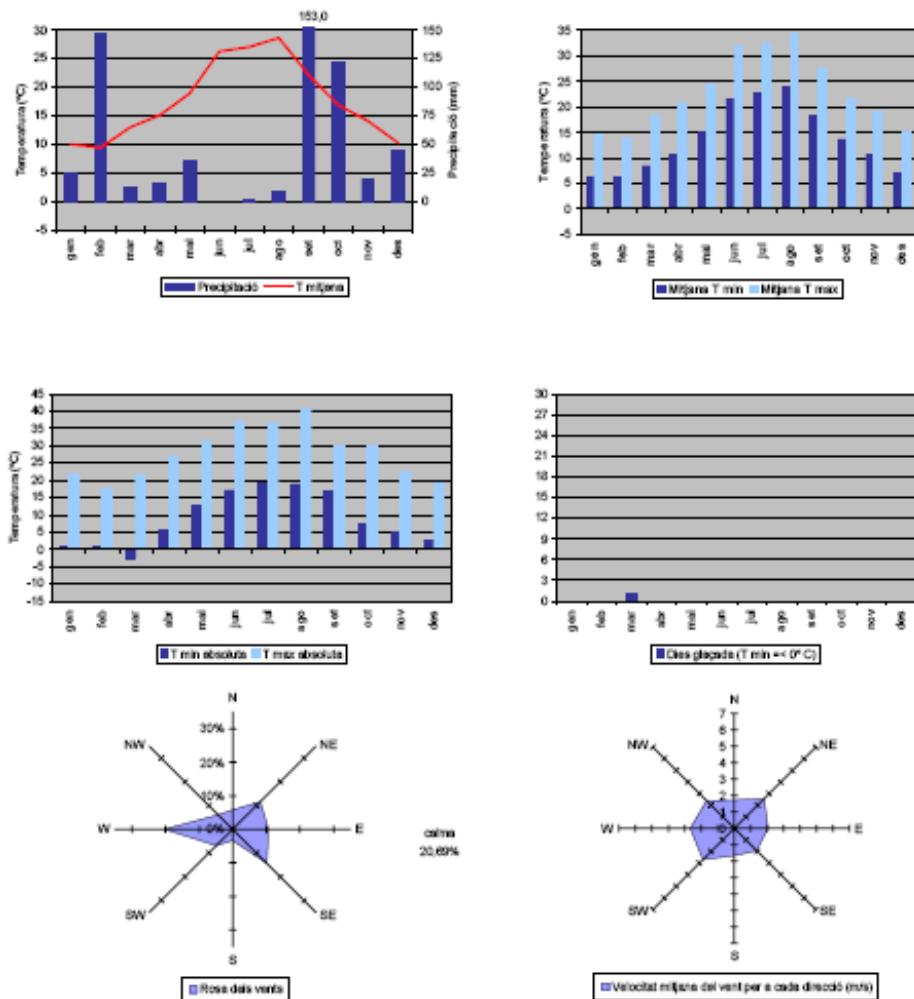
Para realizar el cálculo de la dispersión de contaminantes, urgen unos datos viables.

Por ello, se han utilizado datos medios anuales de la estación meteorológica más cercana al punto emisor, en este caso de la central meteorológica de Badalona.

Estos datos se presentan a continuación.



BADALONA (Barcelonès)



Resum any 2003

Precipitació total acumulada:	580,6 mm
Temperatura mitjana:	17,7 °C
Mitjana de temperatures màximes:	22,9 °C
Mitjana de temperatures mínimes:	13,7 °C
Temperatura màxima absoluta:	40,8 °C (13/08/2003)
Temperatura mínima absoluta:	-2,7 °C (08/03/2003)
Velocitat mitjana del vent (a 10 m):	1,8 m/s
Direcció dominant:	W
Humitat relativa mitjana	70 %
Irradiació global mitjana diària:	14,2 MJ/m ²

Figura G.4. Datos meteorológicos anuales de la estación meteorológica de Badalona.



H.4 Medidas preventivas y correctoras

H.4.1 Minimización de las emisiones

1. La central dispondrá de un sistema de combustión que garantice bajas emisiones de óxidos de nitrógeno, NOx, permitiendo con ello no rebasar las condiciones de misión límite.
2. Para la evacuación de los gases residuales procedentes de las turbinas de gas, se instalará una chimenea de altura a definir para cada grupo de 400 MW, de acuerdo con los resultados de la aplicación del modelo de dispersión de contaminantes utilizado en el EIA.
3. Control de las emisiones. En las chimeneas de evacuación de los gases se instalarán sistemas de medición en continuo, con transmisión de datos al cuadro de mando de la central, de las concentraciones de los siguientes contaminantes: Dióxido de azufre, óxidos de nitrógeno, y monóxido de carbono. Asimismo, se instalarán equipos de medición en continuo de los parámetros de funcionamiento siguientes: Contenido de oxígeno, temperatura y presión.

H.4.2 Minimización del impacto acústico

En los proyectos de construcción de la central de ciclo combinado se incluirán específicamente las características de aislamiento acústico. Se consideran correctos los valores de emisión de 65 dB(A), aunque el diseño definitivo asegurará el cumplimiento de los criterios utilizados por la Departamento de Medio Ambiente de la Generalitat.

H.4.3 Gestión de los residuos

Los aceites procedentes del mantenimiento de la maquinaria y otros residuos peligrosos, que se generen durante la realización de las obras y durante la explotación de la central, serán retirados por gestores de residuos peligrosos debidamente autorizados, de acuerdo con la legislación vigente en su momento.



El promotor deberá obtener del de la Generalitat la correspondiente autorización de productor de residuos peligrosos.

H.4.4 Programa de vigilancia ambiental

El Programa de Vigilancia Ambiental será definido por el EIA y contemplará, tanto la fase de obras, como la fase de funcionamiento de la central de ciclo combinado, y permitirá el seguimiento y control de los impactos y de la eficacia de las medidas correctoras establecidas en el Estudio de Impacto Ambiental.

